

Univerzita Karlova v Praze  
Matematicko-fyzikální fakulta

## BAKALÁŘSKÁ PRÁCE



Viktor Babjak

### Evoluční rovnice růstu dvousložkového systému na jednodimenzionálním rozhraní

Ústav teoretické fyziky

Vedoucí bakalářské práce: RNDr. Miroslav Kotrla, CSc.  
Studijní program: fyzika, obecná fyzika

2007

## Pod'akovanie

Na tomto mieste by som chcel poďakovať svojmu vedúcemu bakalárskej práce pánovi RNDr. Miroslavovi Kotrlovi, CSc. za podnetné pripomienky, pozorné čítanie mojich výsledkov a vedenie.

Zároveň sa chcem poďakovať všetkým, ktorí robili korektúry mojich poznámok.

Prehlasujem, že som svoju bakalársku prácu napísal samostatne a výhradne s použitím citovaných prameňov. Súhlasím so zapožičiavaním práce a jej zverejňovaním.

V Prahe 29. mája 2007

Viktor Babjak

# Obsah

<b>Abstrakt</b>	<b>7</b>
<b>Úvod</b>	<b>8</b>
<b>1 Základná charakteristika modelov rastu</b>	<b>10</b>
1.1 Metódy popisu a štúdia vývoja rozhrania . . . . .	10
1.2 Diskrétné modely rastu . . . . .	10
1.3 Spojité modely rastu . . . . .	11
1.4 Metódy riešenia . . . . .	13
<b>2 Diskrétné modely rastu binárnych systémov</b>	<b>15</b>
2.1 Balistický depozičný model . . . . .	15
2.2 Náhodný depozičný model . . . . .	16
2.3 Dvojzložkový single-step model . . . . .	18
2.4 Rast Fe/Ni <sub>75</sub> B <sub>25</sub> multivrstvy . . . . .	20
2.5 Epitaxia z molekulových zväzkov . . . . .	21
2.6 Rast A <sub>0.5</sub> B <sub>0.5</sub> filmu . . . . .	23
2.7 Rast Co <sub>1-c</sub> Ag <sub>c</sub> /Ru(0001) zliatiny . . . . .	27
<b>3 Spojitý popis depozičného modelu a MBE modelu binárnej zliatiny</b>	<b>30</b>
3.1 Depozičný model . . . . .	30
3.2 MBE model . . . . .	31
3.3 Počítačové simulácie „brick wall“ modelu . . . . .	33
3.4 Numerická integrácia KPZ a TDLG rovnice . . . . .	36
<b>4 Prechod medzi diskretnými a spojitými modelmi</b>	<b>39</b>
4.1 Odvodenie Langevinovej rovnice pre diskretný súbor výšok . . . . .	39
4.2 Prechod k Langevinovej rovnici pre spojitú funkciu $h(x)$ . . . . .	42
4.3 Odvodenie KPZ rovnice pre RSOS model . . . . .	44
<b>5 Spojitý popis TCSS modelu</b>	<b>48</b>
5.1 Odvodenie KPZ rovnice pre single-step model . . . . .	48
5.2 Majstrovská rovnica pre TCSS model . . . . .	51
5.3 Langevinove rovnice pre vývoj výšky $h(x, t)$ a magnetizácie $m(x, t)$ pre $T \rightarrow \infty$ . . . . .	53

5.4	Analýza vývoja výšky $h(x, t)$ a magnetizácie $m(x, t)$ pre $T \rightarrow 0$ . . . .	56
	<b>Záver</b>	<b>58</b>
	<b>Literatúra</b>	<b>60</b>

# Zoznam obrázkov

1.1	Single-step model . . . . .	11
2.1	Balistický depozičný model . . . . .	15
2.2	Náhodný depozičný model . . . . .	16
2.3	Dvojzložkový single-step model . . . . .	18
2.4	Profil povrchu dvojzložkového single-step modelu . . . . .	19
2.5	Fe/Ni <sub>75</sub> B <sub>25</sub> multivrstva . . . . .	20
2.6	MBE za prítomnosti fázovej separácie . . . . .	23
2.7	Rast filmu A <sub>0.5</sub> B <sub>0.5</sub> MBE simuláciou . . . . .	26
2.8	Rovnovážny stav Co-Ag filmov na Ru(0001) substráte . . . . .	28
2.9	Zliatinová fáza filmu Co <sub>0.6</sub> Ag <sub>0.4</sub> na Ru(0001) substráte . . . . .	29
2.10	Schematické reprezentácie Co-Ag konfigurácii . . . . .	29
3.1	„Brick wall“ model. . . . .	33
3.2	Simulácia „brick wall“ modelu. . . . .	34
5.1	Vývoj povrchu TCSS modelu pre $T \rightarrow 0$ a závislosť len na spine častice na mieste rastu $i$ . . . . .	56
5.2	Vývoj povrchu TCSS modelu pre $T \rightarrow 0$ a závislosť na spine troch najbližších susedných častíc. Konfigurácia s jedným typom spinu častíc. . . . .	57
5.3	Vývoj povrchu TCSS modelu pre $T \rightarrow 0$ a závislosť na spine troch najbližších susedných častíc. Konfigurácia s dvoma typmi spinu častíc. . . . .	57

Názov práce: Evolučné rovnice rastu dvojzložkového systému na jednodimenziálnom rozhraní

Autor: Viktor Babjak

Katedra (ústav): Ústav teoretickej fyziky

Vedúci bakalárskej práce: RNDr. Miroslav Kotrla, CSc

e-mail vedúceho práce: kotrla@fzu.cz

### Abstrakt

V predloženej práci popisujeme niekoľko modelov rastu binárnych systémov, ktoré sa používajú pri štúdiu časového vývoja meniacich sa rozhraní, a vysvetľujeme dynamické škálovanie konkrétnych modelov rastu. Vývoj rozhrania v nerovnováhe popisujeme pomocou diskretných rastových modelov alebo pomocou stochastických diferenciálnych rovníc. Priamy vzťah medzi týmito duálnymi prístupmi je určený pomocou metódy regularizácie. Pre zvolené diskkrétne modely odvodzame zodpovedajúcu majstrovskú rovnicu, z ktorej za použitia Kramers-Moyalovho rozvoja získame príslušnú spojitú Langevinovu rovnicu. Hlavným cieľom práce je vypracovanie súhrnného prehľadu rastu binárnych systémov a analýza odvodenia spojitého popisu pre  $(1 + 1)$  rozmerný single-step solid-on-solid model s dvoma typmi častíc a Isingovskou interakciou. Tento model je založený na single-step modeli, ktorého škálovacie exponenty patria do Kardar-Parisi-Zhangovej (KPZ) triedy univerzality. Pre single-step model takisto odvodzame zodpovedajúcu Langevinovu rovnicu.

Kľúčové slová: rast rozhraní, diferenciálne stochastické rovnice, diskkrétne modely rastu, dvojzložkový systém, Kramers-Moyalova transformácia

Title: Equations of growth of binary system on one dimensional interface  
Author: Viktor Babjak  
Department: Institute of Theoretical Physics  
Supervisor: RNDr. Miroslav Kotrla, CSc  
Supervisor's e-mail address: kotrla@fzu.cz

### **Abstract**

In the presented thesis we describe several growth models of binary system used in the study of the temporal evolution of fluctuating interfaces, and we explain the dynamical scaling of particular growth models. We describe the evolution of interface in a nonequilibrium by discrete growth models or by differential stochastic equations. The relation between these two methods of description is determined by regularization. We derive relevant continuous Langevin equation for the selected growth models from Kramers-Moyal expansion of the master equation. Our main goal is to create the overall summary of the growth models of binary system and to analyse the derivation of the continuous description for a  $(1+1)$  dimensional single-step solid-on-solid growth model with two kinds of particles and Ising-like interaction. This model is based on the single-step model with scaling exponents belong to the Kardar-Parisi-Zhang universality (KPZ) class. We derive relevant Langevin equation for the single-step model.

Keywords: interface roughening, differential stochastic equation, discrete growth models, binary system, Kramers-Moyal expansion

# Úvod

Rast povrchov a rozhraní bol a je predmetom veľkého záujmu. Jednotlivé stochastické procesy prebiehajúce počas rastu môžeme študovať pomocou rôznych rastových modelov. Zložitosť spočíva v tom, že jednotlivé procesy sú väčšinou podstatne odlišné, a je náročné rozpoznať, ako sa podieľajú na výsledných vlastnostiach rastúceho útvaru. Pomocou rastových modelov môžeme popisovať predovšetkým rast pevných látok z pary alebo z kvapaliny. Okrem toho môžeme popisovať aj vývoj rozhrania medzi dvoma nezmiešateľnými kvapalinami, povrch kvapaliny, ktorá difunduje poréznym materiálom.

V prípade jednozložkových rastových modelov je ich použitie obmedzené na popis rastu čistých materiálov, vývoj organizmov jedného druhu a pod. Mikroskopický mechanizmus takýchto problémov v prípade jedného druhu ukladaných častíc bol v minulosti rozsiahle študovaný [1]. Mnoho reálnych dejov však prebieha v skutočnosti v dvoch a viackomponentných systémoch (ide napr. o vznik štruktúr zložených z domén rôznych typov častíc, rast magnetických materiálov z iónov, atómov).

V tejto práci sa zaoberáme dvojzložkovými systémami, ktorých význam môže byť nasledujúci: popis reakcií, ktoré nastávajú na rastúcich povrchoch materiálov, rast binárnej zliatiny z kvapaliny obsahujúcej dva typy častíc, rast kolónie dvoch druhov baktérii, rast tenkých pevných filmov a pod. Cieľom tejto práce je vypracovanie prehľadu o popise vývoja rozhrania dvojzložkového systému a následné odvodenie spojitého popisu, ktorý zodpovedá vybranému dvojzložkovému diskretnému modelu.

Jednotlivé modely rastu môžeme rozdeliť na diskretné a spojité. Jednoduché rastové modely umožňujú študovať jednotlivé stochastické procesy nezávisle. Štúdiom rôznych rastových modelov bolo zistené, že tieto modely môžeme podľa spoločných črt správania rozdeliť do niekoľkých tried. Ak je splnená podmienka univerzality (t.j. ak jednotlivé modely patria do rovnakej triedy univerzality), môžeme výsledky získané pre jednoduché modely zovšeobecniť i na správanie zložitejších systémov, pre ktoré nepoznáme riešenie. Kapitola 1 obsahuje zoznámenie so základnou charakteristikou modelov rastu.

Prehľad modelov rastu binárnych systémov je vypracovaný v kapitole 2. V tejto kapitole sú uvedené nasledujúce dvojzložkové modely: (i) jednoduchšie modely, ktoré umožňujú študovať jednotlivé procesy nezávisle (balistický depozičný model, náhodný depozičný model, dvojzložkový single-step model, epitaxia z molekulových zväzkov za prítomnosti fázovej separácie, rast  $A_{0.5}B_{0.5}$  filmu); (ii) zložitejšie modely (rast Fe/Ni<sub>75</sub>B<sub>25</sub> multivrstvy, rast Co<sub>1-c</sub>Ag<sub>c</sub>/Ru(0001) zliatiny), ktoré sú reálnejšie.



V kapitole 3 je uvedený spojitý popis dvojjložkového depozičného modelu. Tento model je popísaný pomocou dvojice Langevinových rovníc pre vývoj výšky a magnetizácie. B. Drossel a M. Kardar navrhli konkrétny dvojjložkový model („brick wall“ model), ktorý vyhovuje uvedenému spojitému popisu. Vlastnosti tohto modelu sa dajú študovať aj pomocou počítačových simulácií.

V kapitole 4 sa zaoberáme vzájomným vzťahom medzi pravdepodobnostným popisom diskretných modelov a spojitými stochastickými rovnicami, t.j. v tejto kapitole je popísaný prechod medzi diskretnými a spojitými modelmi. Pre jednotlivé diskretné modely môžeme z majstrovej rovnice pomocou Kramers-Moyalovho rozvoja odvodiť Fokker-Planckovu rovnicu, ktorá je ekvivalentná s Langevinovou rovnicou. Prechod k Langevinovej rovnici pre spojitú premennú sa uskutočňuje pomocou vyhladzovacej procedúry. Prakticky sa vyhladzovacia procedúra robí metódou regularizácie.

Kapitola 5 obsahuje analýzu odvodenia spojitého popisu (odvodenie diferenciálnych rovníc) pre dvojjložkový single-step model. Tento skúmaný model je priamym zovšeobecnením single-step modelu.

# Kapitola 1

## Základná charakteristika modelov rastu

### 1.1 Metódy popisu a štúdia vývoja rozhrania

Množstvo objektov v prírode môžeme chápať ako výsledok nejakého druhu rastu. Skutočné mechanizmy rastu sú zvyčajne dosť komplikované, no na popis niektorých znakov daného javu môžeme použiť viac alebo menej zjednodušený model. Jednotlivé modely rastu môžeme zhruba rozdeliť do dvoch skupín:

- diskkrétne modely,
- spojité modely.

Podrobný popis mnohých modelov a ich správanie môžeme nájsť v prehľade [1]; ako stručný úvod do problematiky môže poslúžiť [2].

Dimenziu substrátu, na ktorom prebieha rast objektu, označíme  $d'$ . Objekt rastie v  $d = d' + 1$  rozmernom priestore. Rastúci povrch môžeme dobre aproximovať funkciou  $h(\mathbf{x}, t)$ , kde  $\mathbf{x}$  je  $d'$ -rozmerný vektor popisujúci jednotlivé body substrátu a  $t$  je čas. V prípade, keď povrch nemôžeme priamo popísať funkciou od  $\mathbf{x}$ , tak  $h(\mathbf{x}, t)$  má význam maximálnej výšky v mieste  $\mathbf{x}$ . V prípade diskrétnych polôh na substráte, ktoré môžu častice obsadzovať, je konfigurácia povrchu reprezentovaná  $d'$ -rozmerným súborom výšok stĺpcov, na ktorých sú uložené častice. Výšky jednotlivých stĺpcov sa menia takisto diskkrétne.

### 1.2 Diskkrétne modely rastu

Diskkrétne modely sú dané definovaním: (i) priestoru konfigurácií; (ii) pravidiel rastu, ktoré zahŕňajú možné procesy, a ich pravdepodobností. Povrch študovaného útvaru sa mení v dôsledku troch procesov: depozícií nových častíc na povrch kryštálu, vyparovaniu povrchových častíc a ich migrácii. Tieto procesy nastávajú s pravdepodobnosťami, ktoré závisia na okamžitej konfigurácii. Pri vytváraní modelu sa často

kladú nejaké obmedzenia na geometriu povrchu kryštálu (najčastejšie používanou je jednoduchá kubická mriežka).

Častice sa môžu nachádzať iba na miestach, ktoré zodpovedajú uzlom kryštalickej mriežky, t.j. polohy jednotlivých častíc sú násobkami mriežkovej konštanty  $a$ , a preto na rozlíšenie polôh sa používa bezrozmerný index  $i$ . Premenná  $h_i$  udáva výšku povrchu nad  $i$ -tým miestom.

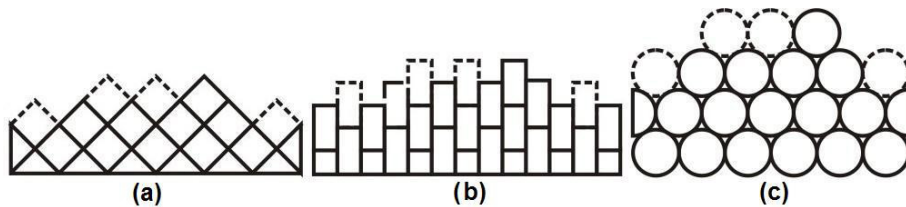
Pri väčšine materiálov dochádza ku vzniku kompaktných útvarov. Príkladom diskrétného modelu je solid-on-solid (SOS) model.

### Solid-on-solid model

SOS model sa používa v rovnovážnej štatistickej mechanike povrchov. Pri SOS modeloch požadujeme, aby každé obsadené miesto bolo priamo nad ďalším obsadeným miestom, t.j. nevznikajú žiadne previsy ani diery.

Špeciálnym variantom je obmedzený soli-on-solid model (angl. *restricted solid-on-solid model*) (RSOS), ktorý je definovaný na jednoduchšej kubickej mriežke a obsahuje dodatočnú požiadavku, aby rozdiel výšok susedných miest spĺňal  $|h_i - h_j| \leq S$ , kde  $S$  je ľubovoľné celé číslo. Najčastejšie sa používa  $S = 1$ .

Na SOS modeli je založený aj single-step solid-on-solid model. Pre tento model požadujeme, aby rozdiel výšok dvoch najbližších susedných miest nadobúdal len dve hodnoty, obvykle  $+1$  alebo  $-1$ . V  $d' = 1$  môže byť reprezentovaný ako: (i) ukladanie štvorcov na štvorcovú mriežku otočenú o  $45^\circ$  (obr. 1.1a); (ii) ukladanie obdĺžnikov na štvorcovú mriežku (obr. 1.1b); (iii) ukladanie sfér na hexagonálnu mriežku (obr. 1.1c). V  $d' = 2$  je single-step-model definovaný na priestorovo centrovanej mriežke - tomu zodpovedá priestorovo centrovaný SOS model (angl. *body-centred SOS model*) (BCSOS). Priestorové konfigurácie BCSOS modelu môžu byť zobrazené do 6-vrcholového modelu.



Obrázok 1.1: Tri rozdielne realizácie single-step modelu pre 1-dimenzionálny substrát. Jednotlivé realizácie sa líšia počtom susedov deponovanej častice. Čiarkované čiary označujú pozície, na ktoré môžu byť uložené nové častice.

## 1.3 Spojité modely rastu

Spojité modely sú dané stochastickou diferenciálnou rovnicou (zovšeobecnená Langevinova rovnica), ktorá je všeobecne nelineárna v premenných popisujúcich po-

vrch. Pre túto rovnicu, podľa ktorej sa riadi časový vývoj povrchu, platí [2]

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \mathcal{F}\{h(\mathbf{x}, t)\} + \eta(\mathbf{x}, t), \quad (1.1)$$

$\eta$  je náhodná premenná reprezentujúca náhodnosť a  $\mathcal{F}$  je funkcionál, ktorý závisí iba na rozdieloch výšok, nie na absolútnych výškach

$$\mathcal{F} = v_0 + \nu \nabla^2 h(\mathbf{x}, t) + \frac{1}{2} \lambda [\nabla h(\mathbf{x}, t)]^2 + \dots, \quad (1.2)$$

kde  $v_0$  je priemerná rýchlosť rastu.

Substrát, na ktorom prebieha rast systému, charakterizujeme pomocou jeho šírky  $W(L, t)$ , pre ktorú platí

$$W(L, t) = \sqrt{\frac{1}{L^{d-1}} \left\langle \sum_{\mathbf{x}} [h(\mathbf{x}, t) - \overline{h(t)}]^2 \right\rangle}, \quad (1.3)$$

kde  $L$  je veľkosť systému.  $\overline{h(t)} = \frac{1}{L^{d-1}} \sum_{\mathbf{x}} h(\mathbf{x}, t)$  predstavuje priemernú výšku, symbol  $\langle \rangle$  má význam štatistického priemeru.

Pre dostatočne veľké časy a veľkosti substrátov  $W$  vyhovuje dynamickej škálovacej hypotéze [3]

$$W(L, t) \approx L^\alpha f(t/L^z), \quad (1.4)$$

kde  $\alpha$  je exponent hrúbky,  $\beta$  exponent rastu a  $z = \alpha/\beta$  dynamický exponent. Škálovacia funkcia  $f(x) = x^\beta$  pre  $x \ll 1$  a  $f(x) = \text{const}$  pre  $x \gg 1$ . Exponenty  $\alpha$  a  $z$  sú charakteristikami pre daný model. Podľa škálovacieho zákona môžeme zaviesť klasifikáciu modelov rastu do jednotlivých *tried univerzality*. Pomocou zjednodušených a teoreticky zvládnuteľných modelov môžeme pochopiť a predpovedať vlastnosti komplexnejších systémov patriacich k rovnakej triede univerzality. Príkladmi jednotlivých tried univerzality je *Edward-Wilkinsonova* (EW) trieda a *Kardar-Parisi-Zhangova* (KPZ) trieda.

### Edward-Wilkinsonov model

EW model je najjednoduchším spojitým modelom rastu (je to spojitá verzia náhodného depozičného modelu s relaxáciou popisujúcou sedimentáciu). Evolučná rovnica má nasledujúci tvar

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h(\mathbf{x}, t) + \eta(\mathbf{x}, t), \quad (1.5)$$

kde  $\eta(\mathbf{x}, t)$  je gaussovský šum vyhovujúci podmienkam

$$\langle \eta(\mathbf{x}, t) \rangle = 0, \quad (1.6)$$

$$\langle \eta(\mathbf{x}, t) \eta(\mathbf{x}', t') \rangle = 2D \delta^{d'}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta t - t'. \quad (1.7)$$

Prvý člen na pravej strane (1.5) reprezentuje difúziu s konštantou  $\nu$ , ktorá má rozmer difúznej konštanty. Výsledkom závislosti lokálnej rýchlosti rastu na lokálnom zakrivení  $\nabla^2 h$  je vyhladenie povrchu, t.j.  $\nu$  sa dá interpretovať ako povrchové napätie.

Pre koeficienty EW triedy univerzality platí

$$2\alpha + d - 1 = \alpha/\beta. \quad (1.8)$$

### Kardar-Parisi-Zhangov model

Kardar, Parisi a Zhang zovšeobecnil EW model tým, že zahrnuli člen  $(\lambda/2)(\nabla h)^2$ , aby objasnili efekt laterálneho rastu. Potom rovnica (1.1) je nelineárna Langevinova rovnica

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h(\mathbf{x}, t) + \frac{\lambda}{2} [\nabla h(\mathbf{x}, t)]^2 + \eta(\mathbf{x}, t). \quad (1.9)$$

Tento spojitý model zohľadňuje povrchové napätie (prvý člen na pravej strane) aj efekt laterálneho rastu (druhý člen na pravej strane).

Pre koeficienty KPZ triedy univerzality platí

$$\alpha + \alpha/\beta = 2. \quad (1.10)$$

## 1.4 Metódy riešenia

Medzi základné metódy používané pri riešení jednotlivých modelov rastu patria: (i) numerické simulácie; (ii) integrácia stochastických rovníc; (iii) renormalizačné grupy a (iv) majstrovské rovnice.

- **numerické simulácie**

V súčasnosti, keď existujú moderné počítače, sa oveľa častejšie používajú numerické simulácie na štúdium komplikovaných problémov, pre ktoré sú dostupné len aproximatívne teórie. Na simulovanie rastu sa najčastejšie používajú programy založené na metóde Monte Carlo.

- **integrácia stochastických rovníc**

Táto metóda riešenia je založená na integrácii stochastických rovníc, pomocou ktorých popisujeme jednotlivé modely. Analyticky sa stochastické rovnice dajú vyriešiť len v jednoduchých prípadoch. V zložitejších prípadoch sa musia riešiť numericky.

- **renormalizačné grupy**

Triedy univerzality v nerovnováhe nie sú určené len symetriou parametrov a dimenziou priestoru, ale takisto aj prítomnosťou resp. absenciou zákonov zachovania a vzťahom medzi Poissonovými zátvorkami. Pri štúdiu rastu je metóda renormalizačných grúp (RG) úspešná len čiastočne, pretože RG rovnice nemôžeme vždy vyriešiť.

- **majstrovské rovnice**

Ďalšie priblíženie pri štúdiu rastu je založené na majstrovských rovniciach [16]. Tieto rovnice sú exaktne vyriešiteľné pre  $d' = 1$  modely a pre veľmi malé systémy v prípade  $d' = 2$ .

## Kapitola 2

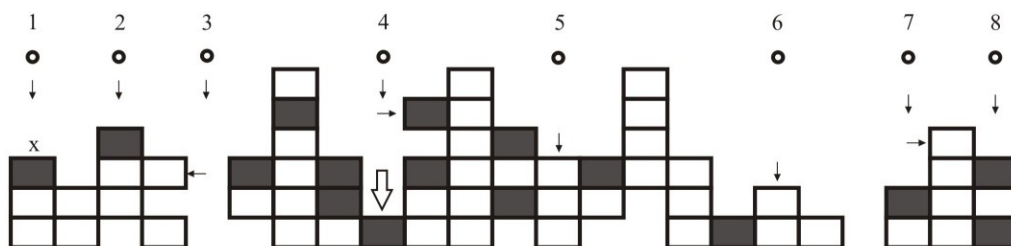
# Diskrétne modely rastu binárnych systémov

V tejto kapitole sú uvedené dva typy binárnych modelov: (i) jednoduchšie modely (balistický depozičný model, náhodný depozičný model, dvojzložkový single-step model, epitaxia z molekulových zväzkov za prítomnosti fázovej separácie, rast  $A_{0.5}B_{0.5}$  filmu); (ii) zložitejšie modely (rast Fe/Ni<sub>75</sub>B<sub>25</sub> multivrstvy, rast Co<sub>1-c</sub>Ag<sub>c</sub>/Ru(0001) zliatiny), ktoré sú reálnejšie.

### 2.1 Balistický depozičný model

Balistický depozičný (BD) model (angl. *ballistic deposition model*) je popísaný v [4] a zameriava sa na to, ako interakcia medzi dvoma rozdielnymi časticami ovplyvňuje kinetiku rastu a morfológiu vznikajúceho povrchu. Tento model je adekvátny popisu reakcií, ktoré nastávajú na rastúcich povrchoch materiálov. Okrem toho popisuje aj depoziáciu dvoch druhov častíc s rozdielnymi príťažlivými silami.

Proces rastu v (1 + 1) dimenzionálnom priestore prebieha podľa nasledujúcich pravidiel: najprv je náhodne vybraný stĺpec na substráte, a potom častica A (alebo častica C) je uložená na povrch s pravdepodobnosťou  $1 - P$  (alebo  $P$ ). Na obr. 2.1 je zobrazená časť takéhoto agregátu. Biele obdĺžniky reprezentujú častice typu A a tmavé obdĺžniky reprezentujú častice typu C. Kružnice popisujú prichádzajúce



Obrázok 2.1: Balistický depozičný model

častice. Dráha padajúcej častice je naznačená pomocou šípok. Depozícia častíc sa odohráva nasledovne:

- ak je prichádzajúca častica typu  $A$ , prilepí sa na prvú časticu  $A$  alebo  $C$ , ktorú stretne, a to buď
  - na vrchu vybraného stĺpca, keď tento stĺpec je vyšší, rovnako vysoký alebo nižší o jednu časticu než susedné stĺpce (častice 1, 2, 5, 6 a 8)
  - alebo na jeho bokoch, keď tento stĺpec je nižší než susedné o viac ako jednu časticu (častice 3, 4 a 7).
- ak je prichádzajúca častica typu  $C$ ,
  - prilepí sa na vybraný stĺpec,
    - \* ak na vrchu tohto stĺpca je častica  $A$  a tento stĺpec je vyšší alebo rovnako vysoký než susedné stĺpce (častice 5 a 6),
    - \* ak na vrchu tohto stĺpca je častica  $C$  a súčasne susedný stĺpec, ktorý je vyšší o jednu časticu, má na vrchu časticu  $A$  (častica 8)
  - a vybraný stĺpec je nižší než susedné stĺpce o viac ako jednu časticu, tak častica  $C$ 
    - \* prilepí sa laterálne, ak nájde časticu  $A$  (častice 3 a 7),
    - \* alebo bude postupovať dole, kým sa nestretne s časticou  $A$  (častica 4, dvojité šípky).
  - neprilepí sa, ak sa stretne s časticou  $C$  (častica 1).

Numerické simulácie rastu BD modelu naznačujú, že takto navrhnutý model nemusí patriť ku KPZ triede univerzality. Odchýlka od tejto triedy univerzality sa mení v rozsahu od 10 do 14 %, kým chyba výpočtu koeficientov je približne 3 % [4]. Pri vývoji BD modelu pri veľkých časových škálach sa môžu zmeniť hodnoty exponentov  $\alpha$  a  $\beta$ , ktoré už budú zodpovedať KPZ triede univerzality.

## 2.2 Náhodný depozičný model

Náhodný depozičný (RD) model (angl. *randomlike deposition model*), ktorý je uvedený v [5], popisuje depozíciu dvoch rozdielnych druhov častíc. Častica  $A$  (ak-



Obrázok 2.2: Náhodný depozičný model



tívna častica) s pravdepodobnosťou  $1 - P$  a častica  $C$  (neaktívna častica) s pravdepodobnosťou  $P$  sú ukladané na  $(1 + 1)$  dimenzionálny substrát. Príklad takéhoto modelu je znázornený na obr. 2.2. Biele obdĺžniky reprezentujú častice typu  $A$  a tmavé obdĺžniky reprezentujú častice typu  $C$ . Častica padá kolmo na substrát.

Keď častica dosiahne povrch rastúceho substrátu, môže sa prilepiť v mieste, na ktoré dopadla, alebo môže difundovať na ďalšiu pozíciu podľa nasledujúcich pravidiel modelu:

- najprv dochádza k depozícii
  - ak častica na vrchu vybraného stĺpca je častica typu  $A$ ,
  - ak častica na vrchu vybraného stĺpca je častica typu  $C$  a súčasne susedný stĺpec, ktorý je vyšší o jednu časticu, má na vrchu časticu  $A$ ,
- potom dochádza k difúzii
  - ak uložená častica je častica typu  $C$ , tak môže difundovať do susedných miest, až kým nedosiahne lokálne minimum výšky,
  - pre časticu typu  $A$  difúzia nie je povolená.

Pre  $P = 0$  sa tento model zhoduje s triviálnym modelom, v ktorom častica padá, až kým nedosiahne vrch vybraného stĺpca, a na tomto mieste aj zostane. Medzi jednotlivými stĺpcami nie sú žiadne korelácie, t.j. ich rast prebieha nezávisle. Pre  $P \neq 0$ , rast jednotlivých stĺpcov výrazne závisí na lokálnej štruktúre, t.j. medzi rozdielnymi stĺpcami existuje určitý vzájomný vzťah.

Z numerických simulácií v [5] vyplýva, že náhodný depozičný model patrí k Edward-Wilkinsonovej triede univerzality. Morfológia vzniknutého povrchu závisí na hodnote pravdepodobnosti  $P$ , t.j. na difúzných procesoch častíc  $C$ .

Fyzikálna motivácia RD modelu môže byť nasledujúca:

- chemické reakcie, ktoré sa odohrávajú pri raste povrchov materiálov.  
Např. v [5] je modelovaná nasledujúca reakcia:  $A + B = C$ . Častice  $A$  aj  $B$  sú aktívne; z týchto častíc vzniká reaktant  $C$ , ktorý už nie je aktívny. Častica  $A$  je vybraná s pravdepodobnosťou  $1 - P$  a častica  $B$  s pravdepodobnosťou  $P$ . Ak  $P$  je malé, tak reaktant  $C$  je produkovaný s pravdepodobnosťou  $P$ . V [5] sa uvažuje difúzia iba pre častice typu  $C$ , ktoré majú menej interagujúce väzby s ďalšími časticami a môžu sa voľnejšie premiestňovať na miesta s lokálnym minimom výšky.
- rast rozhrania materiálu s nízkou koncentráciou nečistôt,
- depozícia jedného druhu ťažkých častíc a ďalšieho druhu ľahkých častíc, medzi ktorými sú rozdielne príťažlivé sily. Ľahšie častice môžu ľahšie difundovať než ťažšie častice.

## 2.3 Dvojzložkový single-step model

Popis dvojzložkového single-step modelu (angl. *two-component single-step model*) (TCSS) je uvedený v [6]. Fyzikálna interpretácia TCSS modelu môže byť nasledujúca: rast binárnej zliatiny z kvapaliny obsahujúcej dva typy častíc alebo rast kolónie dvoch druhov baktérii.

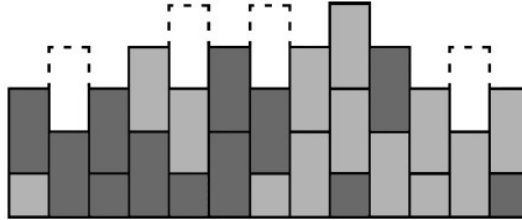
TCSS model je založený na single-step solid-on-solid (SOS) modeli. Uvažujeme dva typy ukladajúcich sa častíc. Konkrétny typ častice označujeme pomocou premennej  $\sigma$ , ktorá nadobúda hodnoty  $+1$  alebo  $-1$  (tieto hodnoty nesúvisia s veľkosťou kroku). Obyčajne sa používa analógia s magnetickými systémami, a tak  $\sigma$  má význam spinu.

Uvažujeme rast povrchu v  $(1 + 1)$  dimenzii, no tento model môže byť zovšeobecnený aj do ľubovoľnej dimenzie. Jednotlivé realizácie single-step geometrie sa líšia počtom možných najbližších susedov pre novú časticu (obr. 1.1) a vedú k trom rozdielnym TCSS modelom. V [6] sa uvažuje varianta s tromi najbližšími susedmi – častica naľavo, pod a napravo od vybraného miesta rastu. Túto variantu môžeme realizovať pomocou ukladania obdĺžnikových blokov, ktorých výška je rovná dvojnásobku šírky (obr. 2.3). Z podmienky pre single-step model vyplýva, že výška týchto obdĺžnikových blokov musí byť 2.

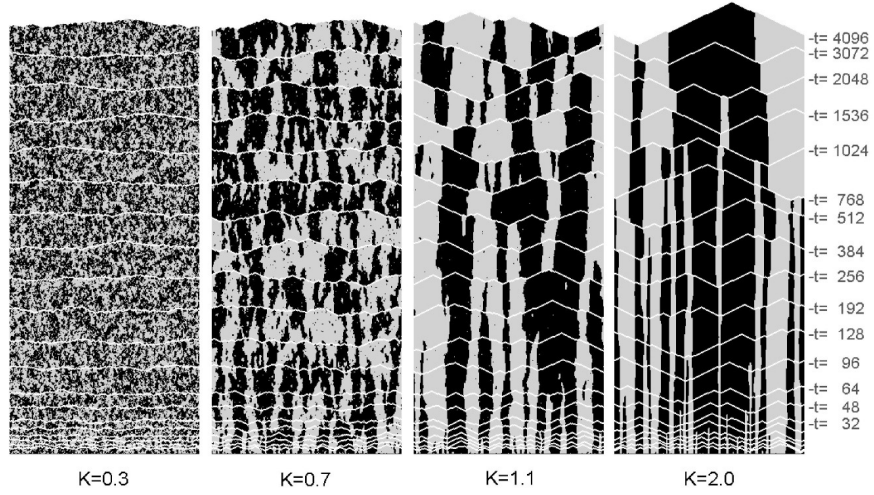
Počas rastu sú častice iba ukladané na povrch substrátu, t.j. neprebíha difúzia ani vyparovanie častíc z povrchu. Dôsledkom single-step požiadavky je, že častice môžu byť pridané iba na miesta s lokálnym minimom výšky. Pravdepodobnosť prídania častice so spinom  $\sigma$  na miesto  $i$  závisí iba na lokálnom okolí tohto miesta a je úmerná  $\exp[-\Delta E(i, \sigma)/k_B T]$ , kde  $k_B$  je Boltzmannova konštanta,  $T$  termodynamická teplota a  $\Delta E(i, \sigma)$  zmena energie súvisiacej s depozíciou novej častice. Energia  $\Delta E(i, \sigma)$  je daná Isingovou interakciou novej častice s časticami v najbližšom susedstve miesta rastu  $i$ . Ak označíme spin častice na vrchu stĺpca na mieste  $i$  (povrchový spin) ako  $\sigma(i)$ , potom pre zmenu energie  $\Delta E(i, \sigma)$  platí

$$\Delta E(i, \sigma) = -J\sigma[\sigma(i-1) + \sigma(i) + \sigma(i+1)] - h\sigma, \quad (2.1)$$

kde  $J$  je väzbová sila a  $h$  vonkajšie pole. Pre  $J$  a  $h$  sa používa vyjadrenie pomocou bezrozmerných konštánt  $K = J/k_B T$  a  $H = h/k_B T$ .



Obrázok 2.3: Dvojzložkový single-step model: Príklad konfigurácie s dvoma typmi častíc (tmavé a svetlé oblasti) pre uvažovanú realizáciu single-step modelu. Čiarkované čiary označujú pozície, na ktoré môžu byť uložená nová častica.



Obrázok 2.4: Príklady vývoja profilov povrchu dvojzložkového single-step modelu pre niekoľko rôznych hodnôt väzbovej sily medzi časticami,  $K = 0.3, 0.7, 1.1, 2.0$  a nulové vonkajšie pole  $h$ . Profily povrchu v rôznych časoch rastúce ako mocnina sú znázornené pomocou svetlých čiar. Pre daný čas je zobrazená iba časť povrchu blízko povrchu. Čierna a sivá farba zodpovedá rozdielnym typom častíc. Veľkosť systému je  $L = 250$ . Obrázok je prevzatý z [6].

Geometria systému je popísaná výškovou korelačnou funkciou

$$G(r, t) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L \langle [h(i+r, t) - h(i, t)]^2 \rangle. \quad (2.2)$$

Evolúcia geometrie systému je ovplyvnená zložením povrchu a naopak. Zloženie povrchu charakterizuje priemerná veľkosť domény na povrchu  $D(t)$ , spinová korelačná funkcia povrchových spinov  $S(r, t)$ , magnetizácia  $M(T)$ , pre ktoré platí

$$S(r, t) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L \langle \sigma(i+r, t) \sigma(i, t) \rangle, \quad (2.3)$$

$$M(t) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L \langle \sigma(i, t) \rangle. \quad (2.4)$$

Vývoj dvojzložkového modelu závisí na interakcii medzi rôznymi druhmi častíc a na začiatočnom zložení povrchu (napr. feromagnetický režim ( $K > 0$ ), antiferomagnetický režim ( $K < 0$ ), náhodné zloženie povrchu). Z Monte Carlo simulácie v [6] pre TCSS model vyplýva, že v začiatočných fázach rastu môžeme pozorovať usporiadanie povrchu. V týchto fázach je hodnota exponentu rastu  $\beta_{\text{TCSS}}$  väčšia ako hodnota zodpovedajúceho exponentu rastu  $\beta_{\text{KPZ}}$  pre KPZ triedu univerzality [7]. No po istom čase sa zastaví usporiadanie pozdĺž povrchu a škálovacie exponenty prejdú na exponenty KPZ triedy univerzality. Pre dostatočne veľkú väzbovú silu medzi

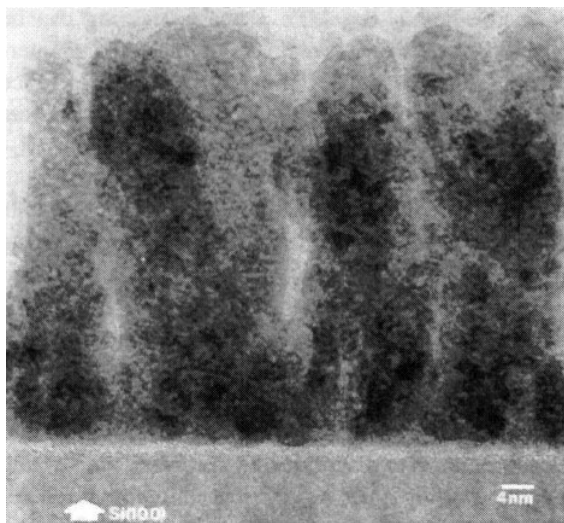
časticami môžeme pozorovať usporiadanie vo vertikálnom smere, ktoré pretrváva pre dostatočne veľké časy (obr. 2.4).

## 2.4 Rast Fe/Ni<sub>75</sub>B<sub>25</sub> multivrstvy

Rast Fe/Ni<sub>75</sub>B<sub>25</sub> multivrstvy (angl. *multilayer*) (Fe/Ni<sub>75</sub>B<sub>25</sub> ML) môžeme popísať pomocou TCSS modelu v (2 + 1) dimenzii [8]. Výsledky Monte Carlo simulácie v [6] pre TCSS model boli potvrdené experimentálne pomocou meraní odrazu röntgenového žiarenia od ML. Mikroskopická štruktúra takejto ML je znázornená na obr. 2.5.

Príprava Ni<sub>75</sub>B<sub>25</sub> filmu a Fe/Ni<sub>75</sub>B<sub>25</sub> ML na Si(100) substráte a konkrétny experiment pre Ni<sub>75</sub>B<sub>25</sub>(72 nm) film a pre [Fe(2 nm)/Ni<sub>75</sub>B<sub>25</sub>(2 nm)]<sub>16</sub> a [Fe(4 nm)/Ni<sub>75</sub>B<sub>25</sub>(4 nm)]<sub>8</sub> ML sú v [8].

Výsledky experimentov sú nasledujúce [8]: V začiatočnom štádiu rastu Fe/Ni<sub>75</sub>B<sub>25</sub> ML je hodnota exponentu rastu  $\beta$  v rozmedzí od 0.55 do 0.57. So zväčšujúcou sa Fe vrstvou a počtom vrstiev Fe/Ni<sub>75</sub>B<sub>25</sub> sa znižuje hodnota exponentu  $\beta$  na hodnotu 0.34. Hodnota  $\beta = 0.34$  zodpovedá KPZ triede univerzality. Pomocou transmisného elektrónového mikroskopu sa potvrdil aj stĺpcový charakter výsledného usporiadania multivrstvy (obr. 2.5).



Obrázok 2.5: Mikroskopická štruktúra získaná pomocou transmisného elektrónového mikroskopu (TEM) Si(100)/Fe(4 nm)/[Ni<sub>75</sub>B<sub>25</sub>(2 nm)/Fe(2 nm)]<sub>16</sub>/Fe(4 nm) ML vzorky. Obrázok je prevzatý z [8].

## 2.5 Epitaxia z molekulových zväzkov za prítomnosti fázovej separácie

Epitaxia z molekulových zväzkov (angl. *molecular beam epitaxy*) (MBE) je proces, pri ktorom sú častice ukladané na povrch pomocou orientovaného zväzku. MBE sa používa pri raste tenkých pevných filmov.

Technika MBE rastu je založená na fakte, že povrchová difúzia je aktivovaný proces. Častice difundujú na povrchu a prekonávajú potenciálnu bariéru s pravdepodobnosťou úmernou  $\exp(-\Delta E/k_B T)$ . Jednotlivé atómy hľadajú konfiguráciu s minimálnou energiou. Tomuto procesu bráni tok prichádzajúcich častíc, napr. častica, ktorá nie je v stave s minimálnou energiou, môže byť zakrytá prichádzajúcou časticou. Dôsledkom tohto nerovnovážneho rastu je, že povrch dosiahne stabilný stav tam, kde šírka povrchu je saturovaná, no povrch nie je v rovnováhe. Najjednoduchším spôsobom rastu vrstvy s MBE je depozícia jedného typu častíc (napr. Si na Si).

V [9] sa pomocou metódy Monte Carlo študuje MBE proces, pri ktorom sa súčasne ukladajú dva typy častíc, a kde medziatómová potenciálna energia vedie k fázovej separácii. Z mikroskopického hľadiska sa v [9] popisuje systém so solid-on-solid (SOS) modelom rozšíreným Isingovým modelom, pomocou ktorého sa popisuje fázová separácia.

### Teoretický popis modelu

Pri popise MBE sa typicky zanedbáva odparovanie častíc a neuvažujú sa previsy ani vakancie. MBE sa modeluje pomocou SOS modelov. Pre diskretný model Hamiltoniánu pre MBE jedného typu atómov podľa [9] platí

$$\mathcal{H}_{\text{SOS}} = \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} |h_i - h_j|^n, \quad (2.5)$$

kde  $h_i$  je diskretná výška v mieste  $i$  a suma prebieha cez všetky najbližšie miesta ( $E_{\text{SOS}} > 0$ )<sup>1</sup>. Exponent  $n$  súvisí so Schwoebelovými bariérami<sup>2</sup>. V tomto prípade sa volí  $n = 1$ .  $\mathcal{H}_{\text{SOS}}$  je úmerný počtu prerušených väzieb na povrchu.

Vlastnosti tohto modelu sa v [9] skúmali v  $(1+1)$  ( $d' = 1$ ) a  $(2+1)$  ( $d' = 2$ ) dimenzii simuláciou Monte Carlo. Väčšina vlastností štruktúry povrchu sa dá získať z povrchového štruktúrneho faktora definovaného ako

$$S_s(\mathbf{k}, t) = \langle \hat{h}(\mathbf{k}, t) \hat{h}(-\mathbf{k}, t) \rangle, \quad (2.6)$$

zároveň platí  $\hat{h}(\mathbf{k}, t) = L^{-d'/2} \sum_{\mathbf{r}} [h(\mathbf{r}, t) - \bar{h}] e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ , kde  $\bar{h}$  je priemerná hodnota pre  $h(\mathbf{r}, t)$ ,  $L$  je veľkosť systému, hranaté zátvorky  $\langle \rangle$  označujú priemer cez nezávislé začiatočné podmienky. Pre povrchový štruktúrny faktor platí jednoduché škálovanie

$$S_s(\mathbf{k}, t) = k^{-\gamma} s(k^z t), \quad (2.7)$$

<sup>1</sup>V SOS modeloch sa energia  $E_{\text{SOS}}$  určuje podľa počtu väzieb medzi časticami.

<sup>2</sup>Schwoebelove bariéry sú popísané v článku: Villain, J.: *Continuum models of crystal growth atomic beams with and without desorption*, J. Phys. I **3** (1991) 19–42.

kde pre exponenty platí hyperškálovacia relácia  $\gamma = z$ . Špecifická škálovacia dĺžka  $\xi$  sa riadi mocninovým zákonom

$$\xi \sim t^{1/z}. \quad (2.8)$$

Pre šírku rozhrania  $W$  platí

$$W^2(L, t) = \left(\frac{L}{a}\right)^{-2} \sum_{\mathbf{r}} \langle [h(\mathbf{r}, t) - \bar{h}]^2 \rangle = a^{d'} \sum_{\mathbf{k}} S_s(\mathbf{k}, t), \quad (2.9)$$

kde  $a$  je mriežková konštanta. Pre korelačnú funkciu platí

$$G_s(\mathbf{r}, t) = \langle [h(\mathbf{r}, t) - h(0, t)]^2 \rangle = r^{2\zeta} g(r/\xi(t)), \quad (2.10)$$

kde  $\zeta$  je nezávislý exponent, pričom jeho hodnota nezávisí na rýchlosti depozície a prítomnosti rovnovážneho hrubnutia povrchu.

Predchádzajúcu škálovaciu reláciu a exponent môžeme reprodukovať z Edward-Wilkinsonovej rovnice

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu \nabla^2 h + F + \eta_h, \quad (2.11)$$

kde  $F$  je rýchlosť depozície a  $\eta_h$  jej nezachováajúce fluktuácie s druhým momentom  $D$ . Štruktúrny faktor v tomto prípade je  $S_s(\mathbf{k}, t) = D/\nu k^2 (1 - e^{-2\nu k^2 t})$ , pre ktorý v stabilnom stave a  $(1+1)$  dimenzii platí  $W = (D/\nu)^{1/2} L^{1/2}$ .

Na popis heteroepitaxie je potrebné v danom modeli zahrnúť interakcie medzi rôznymi druhmi atómov. Najjednoduchším modelom, ktorý umožňuje popísať fázovú separáciu v binárnej zliatine, je Isingov model

$$\mathcal{H}_{\text{Ising}} = -\frac{1}{2} E_{\text{Ising}} \sum_{\langle i, j \rangle} \sigma_i \sigma_j, \quad (2.12)$$

kde  $\sigma_i$  je premenná rovná  $\pm 1$  pre  $A$  alebo  $B$  atóm, suma prebieha cez všetky najbližšie susedné páry.

Pre celkový Hamiltonián pre MBE s fázovou separáciou požadujeme

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{SOS}} + \mathcal{H}_{\text{Ising}}. \quad (2.13)$$

Do tohto modelu vstupujú tri parametre:  $E_{\text{Ising}}/E_{\text{SOS}}$ ,  $k_B T/E_{\text{SOS}}$  a rýchlosť depozície  $F$ .

## Popis modelu pri simulácii

Vychádzame z 1-dimenzionálneho rovného rozhrania veľkosti  $L$ , priestor nad substrátom je rozdelený na štvorcovú mriežku s mriežkovou konštantou  $a = 1$ . Miesto  $i$  (indexované od 1 do  $L$ ) je vybrané náhodne a častica je uložená na miesto s výškou  $h_i + 1$ . V prípade kritickej depozície ( $\sum_{\text{system}} \sigma_i = 0$ ) náhodne vyberieme typ častice ( $+1$  alebo  $-1$ ), ktorá práve dopadla na rozhranie. Potom náhodne skúmame atómy, ktoré sú už uložené. Ak atóm leží na povrchu, tak môže preskočiť na najbližšie

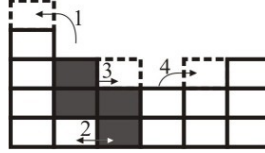
susedné miesto na povrchu (v súlade s procesmi 1, 3 a 4 na obr. 2.6) s rýchlosťou prechodu

$$w_{i \rightarrow j} = \exp \left( -\frac{\Delta \mathcal{H}_{i \rightarrow j}}{T} \right), \quad (2.14)$$

kde  $\mathcal{H}$  je Hamiltonián z rovnice (2.13). Ak atóm leží v objeme, náhodne vyberieme najbližšie susedné miesto a pokúsime sa vymeniť pozíciu dvoch atómov, proces 2 na obr. 2.6.

Pri počítačových simuláciách predpokladáme periodické okrajové podmienky pozdĺž smeru  $x$ , t.j. platí  $h_i = h_i + L$ . Zavedením tejto podmienky odstránime okrajové efekty.

Simulácie pomocou metódy Monte Carlo v [9] poukazujú na dôležité aspekty: (i) nad kritickou teplotou sú filmy homogénne; (ii) vlnová dĺžka zmeny koncentrácie vzrastá s teplotou.



Obrázok 2.6: MBE za prítomnosti fázovej separácie. Procesy 1, 3 a 4 predstavujú povrchovú difúziu, kým proces 2 výmenu objemu.

## 2.6 Rast $A_{0.5}B_{0.5}$ filmu

Základný mechanizmus rastu tenkých filmov (rast domén, hrubnutie povrchu) pre jednoduchý model filmu z binárnej zliatiny  $A_{0.5}B_{0.5}$  v  $(2+1)$  dimenzii sa v [10] študuje MBE simuláciou pomocou metódy Monte Carlo.

### Rast domén

Teoretický popis formovania domén pre prípad nezachováajúceho parametra usporiadania (angl. *a nonconserved order parameter*) (NCOP) je známy ako model A [10], [11]. Tento model môžeme popísať pomocou Langevinovej rovnice pre jednozložkový parameter usporiadania poľa  $\Psi(\mathbf{r}, t)$

$$\frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\Gamma \frac{\delta F}{\delta \Psi(\mathbf{r}, t)} + \eta_0(\mathbf{r}, t), \quad (2.15)$$

kde  $\Gamma$  je pohyblivosť a  $F$  voľná energia, ktorú môžeme vyjadriť ako funkcionál závisiaci na lokálnom parametri usporiadania.  $F$  má Ginzburg-Landauovu formu

$$F = \int d\mathbf{r} \left[ V(\Psi) + \frac{\kappa_0}{2} (\nabla \Psi)^2 \right], \quad (2.16)$$



kde  $V(\Psi) = \frac{1}{2}r_0\Psi^2 + \frac{1}{4}u_0\Psi^4$ , v ktorom  $u_0 > 0$ ,  $r_0 < 0$ , a  $\kappa_0 > 0$  je konštanta súvisiaca s dosahom interakcie. V (2.15)  $\eta_0(\mathbf{r}, t)$  je stochastický šum, pre ktorý platí [10]

$$\langle \eta_0(\mathbf{r}, t) \rangle = 0, \quad (2.17)$$

$$\langle \eta_0(\mathbf{r}, t) \eta_0(\mathbf{r}', t') \rangle = 2k_B T \Gamma \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t'). \quad (2.18)$$

Teoretické riešenie rovnice (2.15) a experimenty pre NCOP poukazujú na to, že priemerná veľkosť domény  $R$  rastie ako funkcia času  $t$  [12]

$$R(t) \sim t^{1/2}. \quad (2.19)$$

Veľkosť domény  $R$  takisto súvisí s exponentom rastu domén  $z_R$

$$R(l) \sim l^{1/z_R}, \quad (2.20)$$

kde  $l$  vyjadruje počet vrstiev na filme. Štruktúrny faktor  $S(k, t)$  dostaneme pomocou Fourierovej transformácie korelačnej funkcie parametra usporiadania  $C(\mathbf{r}, t) = \langle \Psi(\mathbf{r}, t) \Psi(0, t) \rangle$ , kde  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  je lokálny parameter usporiadania. Podľa [10] platí

$$S(\mathbf{r}, t) = \langle \Psi(\mathbf{k}, t) \Psi(-\mathbf{k}, t) \rangle = R(t)^d \tilde{S}(kR(t)), \quad (2.21)$$

kde  $d$  je dimenzia priestoru,  $k$  vlnové číslo a  $\tilde{S}(kR(t))$  škálovacia funkcia. Stredná kvadratická veľkosť domény sa dá ľahko definovať ako [10]

$$R^2(t) = \left\langle \frac{1}{N} \left[ \sum_{\mathbf{r}} \Psi(\mathbf{r}, t) \right]^2 \right\rangle, \quad (2.22)$$

kde  $N$  je celkový počet častíc, ktorý súvisí s  $k = 0$  píkom  $S(\mathbf{k}, t)$ .

## Hrubnutie povrchu

Hrubnutie povrchu pri nerovnovážnom raste tenkého filmu sa obyčajne charakterizuje pomocou šírky substrátu  $W(L, t)$  (1.3) so škálovaním v tvare (1.4). Povrchový štruktúrny faktor môžeme definovať rovnakým spôsobom ako v podkapitole 2.5, t.j. pomocou (2.6) so škálovaním v tvare (2.7).

Spojité Langevinova rovnica, v ktorej sa zachováva celkový počet častíc, je popísaná pomocou povrchového difúzneho toku  $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$  a nezachovájúceho náhodného šumu  $\eta(\mathbf{r}, t)$

$$\frac{\partial h(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) + \eta(\mathbf{r}, t). \quad (2.23)$$

Pre šum  $\eta(\mathbf{r}, t)$  platí

$$\langle \eta(\mathbf{r}, t) \rangle = 0, \quad (2.24)$$

$$\langle \eta(\mathbf{r}, t) \eta(\mathbf{r}', t') \rangle = 2D \delta^{d'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t'), \quad (2.25)$$

kde  $D$  je difúzna konštanta.



Ak  $\mathbf{j} = -v\nabla^2 h$ , dostaneme lineárnu Langevinovu rovnicu

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu \nabla^2 + \eta, \quad (2.26)$$

ktorú pre  $d' = 2$ , môžeme exaktne vyriešiť a dostaneme  $\beta = 0$  a  $z = 2$ . Na základe tohto zistenia sa pre modely popísané rovnicou (2.23) predpokladá hyperškálovacia relácia v tvare

$$z = 2\beta + d'. \quad (2.27)$$

### Popis modelu

Uvažujeme dva druhy častíc ( $A$  a  $B$ ) - materiál typu  $A$  rastie na substráte z materiálu  $B$  (napr. rast  $Ge$  na  $Si$  substráte). Podľa medzipovrchovej voľnej energie a podľa rozdielu v mriežke medzi časticami substrátu a prichádzajúcimi časticami (t.j. podľa rozdielu veľkostí častíc  $A$  a  $B$ ) sú možné tri spôsoby heteroepitaxného rastu, ktoré sú pomenované podľa ich objaviteľov: Frank-van Merwe (FM), Volmer-Weber (VW) a Stranski-Krastanov (SK). V modeli popísanom v [10] sa zanedbáva efekt rozdielnej veľkosti častíc, t.j. rastúci film je určený len medzipovrchovými voľnými energiami.

Počas MBE sa častice náhodne ukladajú (s danou rýchlosťou  $F$ ) na spočiatku rovný substrát, ktorý je udržiavaný na teplote  $T$ . Potom difundujú po celom povrchu, alebo sa odparujú z povrchu.

V [10] sa uvažuje jednoduchý SOS model, v ktorom je substrát tvorený  $L \times L$  štvorcovou mriežkou s periodickými okrajovými podmienkami. Zároveň sa neuvažujú previsy ani vakancie. Predpokladá sa, že teplota počas epitaxie nie je dostatočne vysoká na to, aby dochádzalo k odparovaniu častíc z povrchu. Rýchlosť depozície častíc  $A$  je  $xF$ , kým pre  $B$  je  $(1-x)F$ , kde  $x$  je koncentrácia častíc  $A$ . V tomto modeli sa uvažuje  $x = 0.5$ .

Po náhodnej depozícii častíc  $A$  a  $B$  sa náhodne vyberie častica na difúziu. Každá častica môže na povrchu difundovať s pravdepodobnosťou  $P$ . Pravdepodobnosť preskoku častice  $P_H$  súvisí s prerušením väzieb medzi najbližšími susednými miestami, t.j. pre  $P_H$  platí

$$P_H = \exp[-E(A, B)/k_B T], \quad (2.28)$$

kde aktivačná energia  $E(A, B)$  závisí na lokálnej konfigurácii väzieb (na vytváraní väzieb v danom okolí na substráte) medzi najbližšími susedmi, t.j.  $E(A, B) = n_{AA}J_{AA} + n_{BB}J_{BB} + n_{AB}J_{AB}$ , kde  $n_{AA}$ ,  $n_{BB}$  a  $n_{AB}$  predstavuje počet  $A$ - $A$ ,  $B$ - $B$  a  $A$ - $B$  párov s najbližšími susedmi.  $J_{AA}$ ,  $J_{BB}$  a  $J_{AB}$  sú efektívne väzbové energie medzi  $A$ - $A$ ,  $B$ - $B$  a  $A$ - $B$ , kde  $(J_{AA}, J_{BB}, J_{AB}) = (-J, -J, J)$ ,  $J > 0$ .  $A$ -( $B$ -) typ častice má tendenciu vytvárať väzbu s  $B$ -( $A$ -) typom častice v dôsledku antiferomagnetických interakcií.

Po prerušení väzieb častica na mieste  $i$  difunduje na najbližšie susedné miesto  $k$  s pravdepodobnosťou

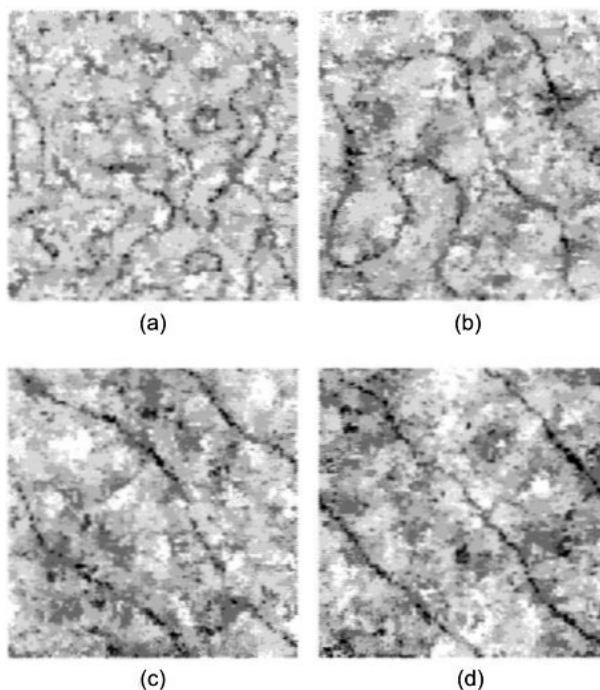
$$P_D(i \rightarrow j) \exp[-E_k(A, B)/k_B T], \quad (2.29)$$

kde  $E_k(A, B)$  je väzbová energia dostupná na mieste  $k$ . Častice nemôžu preskočiť na vyššiu pozíciu, ktorá je od pôvodného miesta vzdialená o viac ako jednu mriežkovú konštantu. Zároveň častice uprednostňujú miesta, ktoré poskytujú najväčšiu väzbovú energiu.

### Výsledky MBE simulácií

Pomocou simulácií rastu filmu  $A_{0.5}B_{0.5}$  na  $A[001]$  v  $[10]$  sa získali základné znaky nerovnovážneho správania rastu domén a hrubnutia povrchu. Tieto simulácie dávajú kvalitatívne vlastnosti, no neposkytujú kvantitatívny popis filmu. Na popis d'alekodosahového usporiadania (angl. *a long-range order*) (LRO) a rast domén použili mriežkový model plynu pre binárnu zliatinu.

V začiatočných fázach rastu filmu ako dôsledok krátkodosahového usporiadania (angl. *a short-range order*) (SRO) vznikajú malé zoskupenia usporiadaných domén, v ďalšej fáze sa spoja. Čiastočne usporiadaná vrstva má význam vzoru pre usporiadanie v ďalšej vrstve. V ďalšom časovom vývoji sa ako dôsledok procesov hrubnutia filmu objavujú špecifické vzory domén. Formovanie povrchu rastúceho filmu je znázornené na obr. 2.7. Stredná kvadratická veľkosť domény  $R$  lineárne závisí na počte vrstiev  $l$ . K saturácii (nasýteniu) dochádza po  $l_s \sim L^{z_R}$ , kde pre exponent rastu domén  $z_R$  platí  $z_R = 2.02$ . V posledných fázach je hrubnutie povrchu dané spojitou



Obrázok 2.7: Sériá pohľadov zhora na povrch rastúceho filmu v štyroch rôznych časoch (a)  $t = 10$ , (b)  $t = 100$ , (c)  $t = 500$ , (d)  $t = 2000$  pre  $L = 80$ . Svetlejšie farby označujú miesta s väčšou výškou. Obrázky sú prevzaté z [10].

rovnice

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu \nabla^2 h - \kappa \nabla^4 h + \eta(\mathbf{r}, t), \quad (2.30)$$

kde  $\nu \nabla^2 h$  je Laplaceovský člen (súvisí s EW modelom, ktorý je popísaný rovnicou (1.5)) a člen  $\kappa \nabla^4 h$  súvisí s povrchovou difúziou.

V začiatkovej fáze je morfológia filmu určená difúznym členom v rovnici (2.30), ktorý vedie k škálovaniu v tvare [10]

$$w_s^2(L) \sim L^2. \quad (2.31)$$

Konečná morfológia povrchu je určená Laplaceovským členom v rovnici (2.30). Škálovacia relácia má nasledujúci tvar [10]

$$w_s^2 \sim (D/2\pi\nu) \ln(L). \quad (2.32)$$

## 2.7 Rast $\text{Co}_{1-c}\text{Ag}_c/\text{Ru}(0001)$ zliatiny

Rast  $\text{Co}_{1-c}\text{Ag}_c$  filmu na  $\text{Ru}(0001)$  substráte [13] je príkladom rastu, keď rozdielna vzdialenosť medzi najbližšími časticami filmu a substrátu (v angličtine sa to označuje ako *mismatch*) spôsobuje napätie, ktoré môže významne ovplyvniť štruktúru vznikajúceho filmu. Napätie vnútri filmu sa uvoľňuje pomocou dvoch mechanizmov:

- tvorba dislokácií pri kritickej hrúbke filmu v prípade rastu jednozložkového filmu (pre kovy je táto kritická hrúbka typicky niekoľko monovrstiev),
- tvorba zliatiny v prípade rastu viaczožkových filmov. Pomocou tohto mechanizmu sa vysvetľuje formovanie zliatiny z nezmiešateľných kovov v tenkom filme.

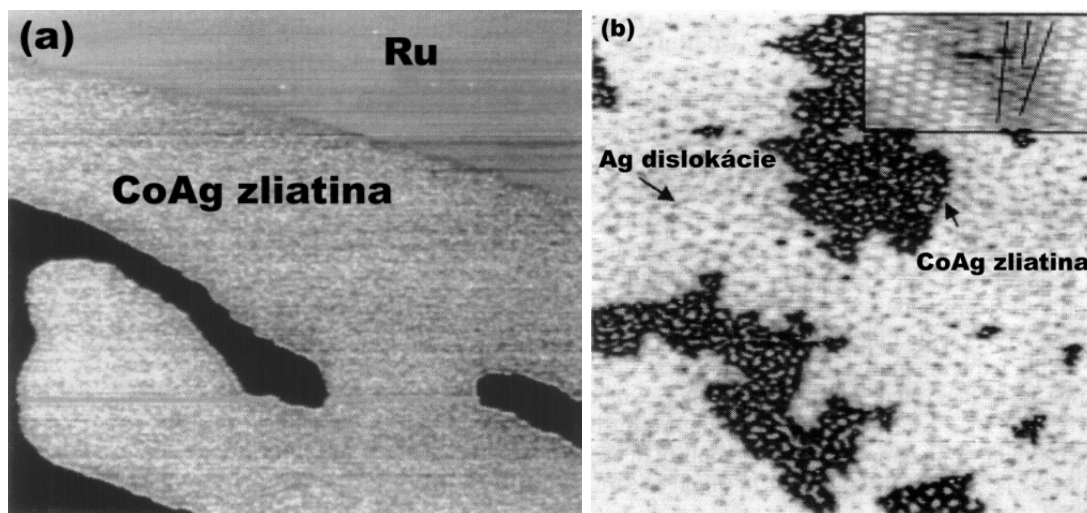
$\text{Co}(111)$  mriežka (vzdialenosť najbližších susedov 2.50 Å) je menšia ako  $\text{Ru}(0001)$  (2.71 Å) substrát približne o 7 %, kým  $\text{Ag}(111)$  mriežka (2.89 Å) je väčšia približne o 8 %. To môže viesť k formovaniu Co-Ag zliatiny v prvej monovrstve. Samotná monovrstva filmu Ag na Ru substráte obsahuje dislokácie <sup>3</sup>, no monovrstva Co filmu neobsahuje <sup>4</sup>. Co ani Ag nie sú rozpustné s Ru pri teplotách a časových škálach počas experimentu [13].

Experimenty v [13] boli prevedené na filmoch, ktoré boli pripravené pri izbovej teplote. Potom boli zažíhané na teplotu 500 °C a následne ochladené na izbovú teplotu. Na obr. 2.8(a) je zobrazený film  $\text{Co}_{0.75}\text{Ag}_{0.25}$ , konkrétne dve terasy Ru - čierne pozadie predstavuje nižšiu terasu Ru substrátu. Na nižšej terase je zobrazená Co-Ag zliatina. Tmavšie oblasti sú čistý Co, kým menšie svetlejšie oblasti sú Ag.

Ak koncentrácia Ag  $c$  prekročí 0.4, tak dochádza ku separácii povrchu na dve odlišné fázy (porušená čistá Ag fáza a pseudomorfickú napätú  $\text{Co}_{0.6}\text{Ag}_{0.4}$  zliatinu),

<sup>3</sup>Hwang, R. Q., Hanilton, J. C., Stevens, J. L., Foiles, S. M., Phys. Rev. Lett. **75** (1995) 4242

<sup>4</sup>Hwang, R. Q. *et al.*, Vac, J., Sci. Technol a **10** (1992) 1970

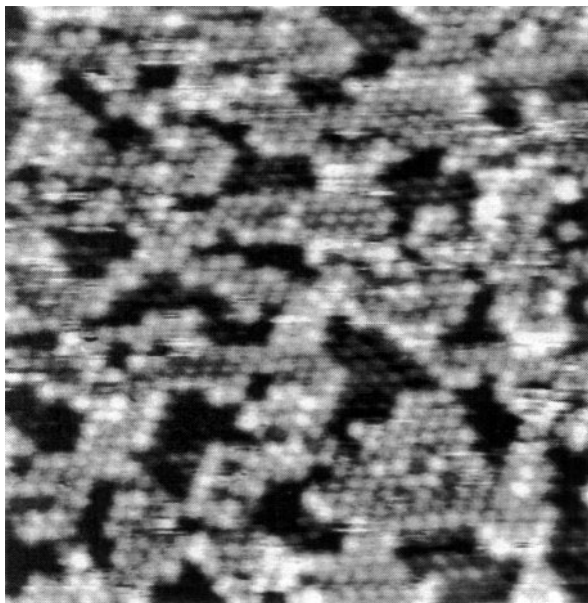


Obrázok 2.8: Rovnovážny stav Co-Ag filmov na Ru(0001) substráte. Ak je koncentrácia Ag väčšia ako 40 %, tak pri raste filmov sa objavuje fázová segregácia: (a)  $1890 \text{ \AA} \times 1680 \text{ \AA}$  obrázok filmu s 25 % obsahom Ag. V pozadí sú dve Ru terasy. (b)  $1000 \text{ \AA} \times 1000 \text{ \AA}$  obrázok filmu s 80 % obsahom Ag. Na obrázku je znázornená dislokácia v čistej Ag fáze (je zobrazený chýbajúci rad atómov v atómovej mriežke). Obrázky sú prevzaté z [13].

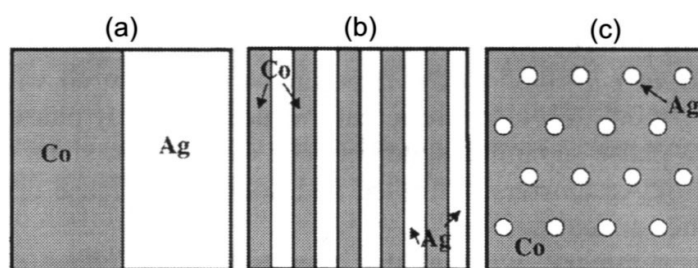
ktoré existujú súčasne [13]. Táto štruktúra je podobná štruktúre pre Ag/Ru(0001) systém. Na obr. 2.8(b) je zobrazený film  $\text{Co}_{0.2}\text{Ag}_{0.8}$ .

Väčšina študovaných štruktúr môže byť reprezentovaná pomocou periodického usporiadania  $(\text{Co})_m/(\text{Ag})_m$  pásov pozdĺž jedného z dvoch symetrických smerov [100] alebo [010] (obr. 2.10(b)). Tento súbor štruktúr zahŕňa jednoduché periodické štruktúry a dve hexagonálne usporiadané fázy (obr. 2.10).

Obrázok 2.9 získaný pomocou skenovacieho tunelovacieho mikroskopu (STM) poukazuje na to, že v zliatinovej fáze nie sú žiadne dislokácie. Co atómy sú na obr. 2.9 svetlejšie, kým Ag atómy sú tmavšie.



Obrázok 2.9: Obrázok s atómovým rozlíšením  $\text{Co}_{0.6}\text{Ag}_{0.4}$  zliatinovej fázy na  $\text{Ru}(0001)$  získaný pomocou STM. Obrázok je prevzatý z [13].



Obrázok 2.10: Schematické reprezentácie Co-Ag konfigurácii: (a) referenčný stav pozostávajúci zo separovaných fáz Co a Ag; (b)  $(\text{Co})_m/(\text{Ag})_m$  pásy pozdĺž smeru  $[100]$  alebo  $[010]$ ; (c) hexagonálne usporiadaná fáza pozostávajúca z Ag kvapiek v Co filme. Obrázok je prevzatý z [13].

## Kapitola 3

# Spojité popis depozičného modelu a MBE modelu binárnej zliatiny

Uvažujeme rast binárnej zliatiny na  $d'$ -dimenzionálnom substráte. Nech  $\mathbf{x}$  je súradnica kolmá k smeru rastu a  $t$  je čas. Hrúbku povrchu a fázové usporiadanie charakterizuje

- výšková premenná  $h(\mathbf{x}, t)$ , ktorá popisuje profil povrchu v mieste  $\mathbf{x}$  a v čase  $t$
- parameter usporiadania  $m(\mathbf{x}, t)$ , ktorý popisuje rozdiel hustôt dvoch typov častíc na povrchu v mieste  $\mathbf{x}$  a v čase  $t$

V tejto kapitole je podľa [19] uvedený spojitý popis dvoch dvojzložkových diskretných modelov (popis depozičného modelu a MBE modelu). B. Drossel a M. Kardar v [20] navrhli konkrétny dvojzložkový model („brick wall“ RSOS model), pre ktorý platia rovnice navrhnuté v [19].

### 3.1 Depozičný model

Vzťah medzi fluktuáciami v  $m$  a výškou  $h$  je fenomenologicky zachytený pomocou dvojice Langevinových rovníc, viď [19]

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu \nabla^2 h + \frac{\lambda}{2} (\nabla h)^2 + \frac{\chi}{2} m^2 + \zeta_h, \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial m}{\partial t} = K(\nabla^2 m - rm - um^3) + a \nabla h \cdot \nabla m + bm \nabla^2 h + \frac{c}{2} m (\nabla h)^2 + \zeta_m \quad (3.2)$$

s gaussovskými šumami  $\zeta_h, \zeta_m$  v tvare

$$\langle \zeta_h(\mathbf{x}, t) \zeta_h(\mathbf{x}', t') \rangle = 2D_h \delta^{d'}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t'), \quad (3.3)$$

$$\langle \zeta_m(\mathbf{x}, t) \zeta_m(\mathbf{x}', t') \rangle = 2D_m \delta^{d'}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t'). \quad (3.4)$$

Rovnica (3.1) je až na člen s  $m^2$  Kardar-Parisi-Zhangova rovnica pre rast povrchu. Rovnica (3.2) pre  $a = b = c = 0$  je časovo závislá Landau-Ginzburgova rovnica (angl.



the time dependent Landau-Ginzburg equation) (TDGL rovnica) pre Isingov model. Tieto rovnice sa používajú na popis depozičného modelu <sup>1</sup> s odparovaním. Častice sa ukladajú na jednotlivé miesta povrchu s pravdepodobnosťou závisiacou na lokálnom okolí daného miesta. Väzbové členy v Langevinových rovniciach (3.1) a (3.2) majú nasledujúci význam:

- pre stabilitu je potrebné, aby bolo splnené  $\nu > 0$ ,  $u > 0$ ,  $K > 0$ ;
- ak je  $\chi > 0$ , tak člen úmerný  $\chi$  znamená, že častice sú s väčšou pravdepodobnosťou adsorbované vnútri domén, kde cítia silnejšiu príťažlivú silu;
- záporné  $\chi$  môže mať takýto význam: ak rýchlosť adsorpcie vnútri domén je limitovaná dostupnosťou zodpovedajúceho typu častíc, môže to viesť k spomaľeniu rastu;
- príspevok od  $a > 0$  znamená, že steny domén majú tendenciu klesať do nižších častí substrátu;
- kladné  $b$  poukazuje na to, že nové domény sa s väčšou pravdepodobnosťou formujú v miestach s väčšou výškou  $h(\mathbf{x}, t)$ , pretože na týchto miestach je menší počet susedných častíc, ktoré môžu ovplyvniť typ adsorbovanej častice;
- člen úmerný  $c$  má podobný charakter ako  $\lambda$  vyjadrujúce nelinearitu v KPZ rovnici.

S týmto modelom súvisia aj ďalšie nerovnovážne systémy. Takýto systém získame, ak steny domén považujeme za „častice“, na ktorých záleží rast povrchu. Ak zavedieme substitúciu  $\nabla m = \rho$  a predpokladáme, že v rovnici (3.2) platí  $u = b = c = 0$ , tak získame nasledujúcu rovnicu pre  $\rho$ , viď [19]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \kappa \nabla^2 \rho + a \nabla(\rho \nabla h) + \zeta_\rho(\mathbf{x}, t) \quad (3.5)$$

so šumom  $\zeta_\rho$ .

## 3.2 MBE model

Modely pre MBE typicky predpokladajú, že depoziícia častíc na povrchu substrátu prebieha náhodne, a že nedochádza ku desorpcii častíc. V tomto prípade je profil povrchu a dynamika parametra usporiadania ovplyvnená difúziou častíc na povrchu. Táto fyzikálna situácia <sup>2</sup> vedie k rozdielnej dvojici Langevinových rovníc, viď [19]

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu \nabla^2 h + \frac{\kappa}{2} m^2 + \zeta_h, \quad (3.6)$$

<sup>1</sup>Predpokladáme, že v tomto popise modelu sú zahrnuté všetky významné členy súvisiace s potenciálmi, ktoré sú kompatibilné so symetriou  $m \rightarrow -m$ . V experimentoch alebo počítačových simuláciách sa táto symetria dá dosiahnuť nastavením vhodnej hodnoty pomeru medzi dvoma typmi adsorbovaných častíc.

<sup>2</sup>Predpokladáme symetriu  $m \rightarrow -m$ .

$$\frac{\partial m}{\partial t} = K \nabla^2 m - vm + \zeta_m, \quad (3.7)$$

kde pre gaussovské šumy  $\zeta_h$  a  $\zeta_m$  platí

$$\langle \zeta_h(\mathbf{x}, t) \zeta_h(\mathbf{x}', t') \rangle = 2D_h \delta^{d'}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t'), \quad (3.8)$$

$$\langle \zeta_m(\mathbf{x}, t) \zeta_m(\mathbf{x}', t') \rangle = 2D_m \delta^{d'}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t'). \quad (3.9)$$

Dôsledkom zachovávať sa objemu počas povrchovej difúzie je, že deterministické členy na pravej strane rovnice (3.6) musia byť divergenciou toku, a že v rovnici (3.6) sa nevyskytujú členy úmerné  $\lambda$  a  $\chi$  vystupujúce v rovnici (3.1). Záporná hodnota  $\kappa$  znamená, že častice sú s väčšou pravdepodobnosťou adsorbované vnútri domén. Rovnica (3.7) pre parameter usporiadania  $m$  obsahuje divergenciu toku a nezachovávať príspevok  $-vm$ , ktorý je dôsledkom toku prichádzajúcich častíc, ktorý vedie k znižovaniu hodnoty parametra usporiadania  $m$ . Člen najnižšieho rádu v (3.7), ktorý súvisí s výškovou premennou  $h$ , má tvar  $\nabla^2(m \nabla^2 h)$ , no neuvažujeme ho, pretože je nepodstatný. Člen úmerný  $m^3$  sa takisto neuvažuje.

Smerovanie k fázovej separácii je lokálne zachytené pomocou  $K < 0$ . Zmena znamienka  $K$  označuje začiatok fázovej separácie. Členy vyššieho rádu  $\nabla^4 m$  alebo  $\nabla^2 m^3$  sú potrebné pre stabilitu krátkovlnných fluktuácií a môžu takisto ovplyvniť presný tvar usporiadania vnútri domén. Tieto členy nie sú v rovnici (3.7) zahrnuté, pretože uvažujeme správanie systému pri veľkých vlnových dĺžkach. V uvažovanom prípade môžu nestability pretrvávať iba do dĺžok rádu  $\sqrt{K/v}$  (táto škála je stanovená podľa toku prichádzajúcich častíc). Pri zvyšovaní teploty a rýchlosti depozície je pravdepodobné, že parameter  $K$  sa stane kladným.

Ak dimenzia substrátu je  $d' = 1$ , tak  $K$  je kladné a dynamika systému je podobná 1-dimenzionálnemu Isingovmu modelu, v ktorom nemôže byť žiadna usporiadaná fáza. Kvôli tomu voľba  $K < 0$  nezachycuje správanie systému pri veľkých vlnových dĺžkach. Dimenzia  $d' = 1$  je výhodná, pretože difúzia pokračuje pozdĺž preferovaného smeru.

Pri dostatočne veľkých dĺžkach je výškový profil povrchu rastúceho rozhrania charakterizovaný ako, viď [19]

$$\langle [h(\mathbf{x}, t) - h(\mathbf{x}', t')]^2 \rangle \sim |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^{2\chi} g\left(\frac{|t - t'|}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^{z_h}}\right), \quad (3.10)$$

kde  $\chi$  je exponent hrúbky a  $z_h$  dynamický exponent.

Hodnoty parametra usporiadania sú rozdielne v smere rastu a v smere kolmom na smer rastu [19]. Na rozdiel od výškovej premennej nie je parameter usporiadania v pevnom bode určený presne, a preto uvažujeme korelačnú dĺžku  $\xi$ . Pre výšku a pre parameter usporiadania pripúšťame možnosť rozdielnych dynamických exponen-tov  $z_h$  a  $z_m$ . Potom pre parameter usporiadania platia škálovacie relácie v nasledujúcom tvare, viď [19]

$$\begin{aligned} G_m^{(x)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') &\equiv \langle m(\mathbf{x}, t) m(\mathbf{x}', t) \rangle - \langle m \rangle^2 \\ &= |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^{\eta-1} g_m^\perp(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|/\xi), \end{aligned} \quad (3.11)$$

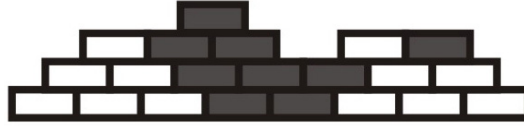


$$\begin{aligned}
 G_m^{(t)}(t - t') &\equiv \langle m(\mathbf{x}, t)m(\mathbf{x}', t) \rangle - \langle m \rangle^2 \\
 &= |t - t'|^{(\eta-1)/z_m} g_m^{\parallel}(|t - t'|/\xi^{z_m}).
 \end{aligned}
 \tag{3.12}$$

### 3.3 Počítačové simulácie „brick wall“ modelu

Uvažujeme numerické simulácie „brick wall“ RSOS modelu, vid' obr. 3.1. Tento model má rovnakú symetriu a zákony zachovania ako Langevinove rovnice (3.1) a (3.2), a tak môže mať aj rovnaké všeobecné vlastnosti [19].

Simulácia „brick wall“ modelu v  $(1 + 1)$  dimenzii začína na rovnom povrchu. Častice sú pridávané tak, aby stred každej častice bol na vrchu rozhrania medzi dvoma časticami v spodnej vrstve, vid' obr. 3.1. Uvažujeme dva typy častíc,  $A$  a  $B$  (čierne a biele obdĺžniky na obrázku). Pravdepodobnosť pridania častice na dané miesto substrátu a pravidlo pre výber typu častice závisí na lokálnom okolí. Rast na úbočí substrátu prebieha pomalšie, a preto pravidlá rastu tohto modelu sú v zhode s  $\lambda < 0$ .



Obrázok 3.1: „Brick wall“ model.

Ak častice typu  $A$  resp.  $B$  sú s väčšou pravdepodobnosťou pridané do oblasti s dominujúcim typom častice  $A$  resp.  $B$ , tak dochádza k fázovej separácii a začínajú sa formovať domény. V tomto prípade korelačná dĺžka  $\xi$  súvisí s priemernou veľkosťou domény.

Zmenou pravidiel rastu môžeme študovať prípady, v ktorých niektoré alebo všetky parametre  $a$ ,  $b$ ,  $c$  a  $\chi$  vymiznú (jednotlivé parametre vyjadrujú prepojenie medzi výškou  $h$  a parametrom usporiadania  $m$ ). Takto môžeme skúmať rozdielne možnosti, pri ktorých sa navzájom ovplyvňuje výška a parameter usporiadania.

Ak všetky parametre vyjadrujúce prepojenie medzi výškou a parametrom usporiadania vymiznú ( $a = b = c = \chi = 0$ ), tak dostaneme nasledujúce hodnoty exponentov: (i)  $z_h = 3/2$  a  $\chi = 1/2$ , ktoré zodpovedajú KPZ rovnici; (ii)  $z_m = 2$  a  $\eta = 1$ , ktoré zodpovedajú Glauberovmu modelu, [22]. Túto situáciu môžeme zrealizovať nasledujúcim spôsobom: Náhodne sa vyberie miesto na povrchu, na ktoré je pridaná častica, pričom musí byť splnená podmienka, že sa nezačnú formovať previsy. Typ ukladanej častice je zvolený podľa typu dvoch susedných častíc v spodnej vrstve. Ak obidve susedné častice sú rovnakého typu, tak pridaná častica bude: (i) toho istého typu s pravdepodobnosťou  $1 - p$ ; (ii) druhého typu s pravdepodobnosťou  $p$ , kde  $p$  je oveľa menšie ako 1. Pre  $p$  platí  $p = \exp(-4J/k_B T)$ ,  $J$  je 1D Isingova konštanta,  $k_B$  je Boltzmannova konštanta a  $T$  je teplota. Ak susedné častice v spodnej vrstve sú rozdielneho typu, tak pridaná častica je jedného alebo druhého typu s pravdepo-

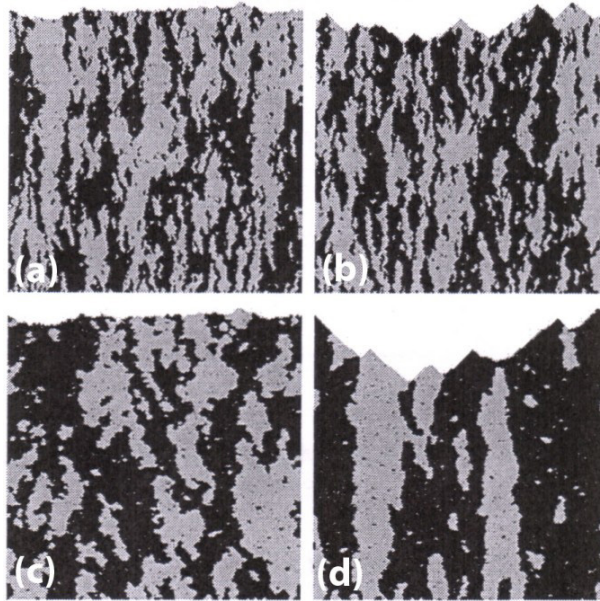
dobnosťou  $1/2$ . Typ ďalších častíc v spodnej vrstve nezohráva úlohu pri výbere typu pridávanej častice. Týmto pravidlám rastu zodpovedá korelačná dĺžka  $\xi \sim 1/\sqrt{p}$  pre  $p \rightarrow 0$ , [19].

Zaujímavejšia je situácia, keď  $\chi$  alebo  $a$ ,  $b$ ,  $c$  (alebo všetky parametre) sú nenulové. V prvom prípade parameter usporiadania  $m$  ovplyvňuje výškovú premennú, no nie je ňou ovplyvnený. V druhom prípade výškový profil ovplyvňuje dynamiku parametra usporiadania, no nie naopak. Príklady takýchto povrchov sú znázornené na obr. 3.2.

### Rast ovplyvnený nezávislým fázovým usporiadaním ( $\chi \neq 0$ , $a, b, c = 0$ )

Pre prípad  $\chi > 0$  resp.  $\chi < 0$  sú charakteristické hodnoty parametra  $r < 1$  resp.  $r > 1$ . Ak typ novej častice závisí iba na type častíc v spodnej vrstve, tak parameter usporiadania  $m$  nie je ovplyvnený výškovou premennou  $h$  a dynamika je rovnaká ako pre Isingov model, pre ktorý platí  $z_m = 2$ .

- situácia, keď  $\chi > 0$ : Rast na hraniciach domén prebieha pomalšie ako vnútri domén, a tak hranice domén sa nachádzajú v lokálnych minimách výškového profilu, viď obr. 3.2. To znamená, že v rozsahu do korelačnej dĺžky  $\xi$  je exponent



Obrázok 3.2: Simulácia „brick wall“ modelu pre rôzne hodnoty parametrov vyjadrujúcich vzťah medzi výškovou premennou  $h$  a parametrom usporiadania  $m$ . Na jednotlivých obrázkoch je zobrazených posledných 400 vrstiev pri simulácii pre veľkosť systému  $L = 200$  a pravdepodobnosť výberu typu častice  $p = 1/90$ . (a)  $\chi = a = b = c = 0$ ; (b)  $\chi > 0$ ,  $a = b = c = 0$ ; (c)  $\chi = 0$ ,  $a > 0$ ; (d)  $\chi > 0$ ,  $a > 0$ . Obrázok je prevzatý z [19].

hrúbky  $\chi = 1$ . Zmeny vo výškovom profile v tomto rozsahu vyplývajú z difúzie stien domén, tomu zodpovedá dynamický exponent  $z_h = 2$ . Pri dĺžkových škálach o mnoho väčších ako  $\xi$  je priemerná hodnota parametra usporiadania nulová, a tak dostaneme exponenty, ktoré zodpovedajú KPZ triede univerzality, t.j.  $\xi = 1/2$  a  $z_h = 3/2$ .

- situácia, keď  $\chi < 0$ : Rast povrchu prebieha s väčšou pravdepodobnosťou na hraniach domén, a tak steny domén sa nachádzajú v lokálnych maximách výškového profilu. V tomto prípade pre exponent hrúbky a pre dynamický exponent dostaneme hodnoty  $\chi = 1/2$  a  $z_h = 3/2$ .

### Fázové usporiadanie ovplyvnené nezávislým rastom ( $\chi = 0$ , $a$ , $b$ , $c \neq 0$ )

Prípady  $\chi = 0$  zodpovedá hodnota parametra  $r = 1$ , t.j. jednotlivé častice sú na každé možné miesto pridané s rovnakou pravdepodobnosťou, a to bez ohľadu na typ susedných častíc.

Vplyv hrúbky povrchu na parameter usporiadania (nenulové  $a$ ,  $b$  alebo  $c$  v rovnici (3.2)) sa popisuje nasledovne: typ pridávanej častice nezávisí iba na type dvoch susedných častíc v spodnej vrstve, ale aj na type dvoch susedných častíc v rovnakej vrstve, ak tieto miesta sú už obsadené. S pravdepodobnosťou  $1 - p$  nová pridávaná častica bude rovnakého typu, ako je väčšina z 2, 3 alebo 4 susedných častíc. S pravdepodobnosťou  $p$  bude druhého typu. V prípade, že medzi susednými časticami je rovnaký počet častíc jedného aj druhého typu, tak typ novej pridávanej častice je zvolený s pravdepodobnosťou  $1/2$ .

Hodnotám parametrov  $a > 0$ ,  $b > 0$  zodpovedá netriviálna hodnota dynamického exponenta  $z_m \simeq 1.85$  (KPZ modelu zodpovedá hodnota  $z_m = 1.5$ ). Hodnota  $z_m$  závisí na hodnote parametra  $a$ . Zmenu hodnoty  $a$  môžeme v počítačových simuláciách zrealizovať tak, že susedné častice v rámci jednej vrstvy budeme považovať za miesta rastu, ktoré sú popísané pravdepodobnosťou  $q$  menšou ako 1. Pre hodnoty  $q = 1, 0.25, 0.125, 0$  dostaneme  $z_m = 1.8, 1.89, 1.96, 2.0$ , viď [19].

### Vzájomné prepojenie rastu a fázového usporiadania ( $\chi$ , $a$ , $b$ , $c \neq 0$ )

Ak všetky parametre  $\chi$ ,  $a$ ,  $b$ ,  $c$  sú nenulové, tak pravdepodobnosť pridaní častice na dané miesto a voľba typu častice závisia na lokálnom okolí miesta rastu. Parameter  $q$  je kladný a  $r$  je rôzne od 1.

Pre  $\chi > 0$  je  $z_m = 2$  bez ohľadu na hodnoty  $a$ ,  $b$  a  $c$ . Ak sú častice pridávané na hranice domén s menšou pravdepodobnosťou ako vnútri domén, tak hranice domén sa väčšinu času nachádzajú v lokálnych minimách výšky. Keďže steny domén sa nachádzajú v lokálnych minimách, tak každá doména obsahuje vyvýšeninu. Pri dĺžkových škálach do  $\xi$  je exponent rastu  $\chi = 1$ . Zmeny výškového profilu pri týchto škálach vyplývajú z difúzie stien domén, tomu zodpovedá dynamický exponent  $z_h = 2$ . Pri dĺžkových škálach o mnoho väčších ako korelačná dĺžka  $\xi$  je priemerná hodnota parametra usporiadania 0 a exponent rastu a dynamický exponent opäť zodpovedajú KPZ triede univerzality, t.j.  $\chi = 1/2$  a  $z_h = 3/2$ .

- pre  $\chi > 0$  sú častice rýchlo pridávané na hranice domén, a tak sa steny domén nemôžu nachádzať v lokálnom minime výšky;
- ak  $a\lambda > 0$ , tak steny domén majú tendenciu prechádzať do vyšších miest; situácia  $\chi < 0$  je podobná prípadu  $\chi = 0$ , pre ktorý platí  $z_m = z_h = 3/2$ ;
- v prípade  $a\lambda < 0$  a  $\chi = 0$  je pohyb stien domén do nižších miest brzdený zväčšujúcimi sa vyvýšeninami, a tak steny domén sa nachádzajú v lokálnych minimách výšky; tento prípad vedie k netriviálnemu (neuniverzálnemu) exponentu  $z_m$ , viď [19];
- pre  $a\lambda < 0$  a  $\chi < 0$  je dynamický exponent  $z_m$  zhodný s  $z_h = 3/2$ ; v tomto prípade pohyb stien domén už nie je nijako obmedzovaný, t.j. ich pohyb sa riadi podľa fluktuácii výšky.

Pomocou počítačových simulácií v [19] sa zistilo, že vzájomné prepojenie medzi hrubnutím povrchu a fázovou separáciou vedie k rôznym novým škálovacím exponentom, [19]. Jedným extrémom je, že výškový profil povrchu sa prispôsobí dynamike usporiadania domén. Ďalším extrémom je, že pohyb stien domén sa riadi podľa fluktuácii výšky.

Model predstavený v [19] sa dá zovšeobecniť, napr. môžeme zahrnúť elastické sily, ktoré sú často prítomné počas rastu zložených filmov.

### 3.4 Numerická integrácia KPZ a TDGL rovnice

Numerickou integráciou KPZ rovnice (3.1) so šumom (3.3) a TDGL rovnice (3.2) so šumom (3.4) môžeme modelovať rast tenkých zložených pevných filmov, viď [21]. Amplitúdy  $D_h$  a  $D_m$  nemajú rovnaký rozmer ( $[D_h] \equiv L^3 t^{-1}$  a  $[D_m] \equiv L t^{-1}$ ), a tak je potrebné rovnice (3.1) a (3.2) urobiť bezrozmernými. To sa dá dosiahnuť nasledujúcim predefinovaním jednotlivých premenných a parametrov.

$$\begin{aligned}
 \tilde{x} &= x \sqrt{\frac{D_m}{D_h}} & \tilde{K} &= \frac{K}{\sqrt{D_m D_h}} \\
 \tilde{t} &= t D_m \sqrt{\frac{D_m}{D_h}} & \tilde{r} &= r \frac{D_h}{D_m} \\
 \tilde{h} &= h \sqrt{\frac{D_m}{D_h}} & \tilde{u} &= u \frac{D_h}{D_m} \\
 \tilde{\nu} &= \frac{\nu}{\sqrt{D_m D_h}} & \tilde{a} &= \frac{a}{D_m} \\
 \tilde{\lambda} &= \frac{\lambda}{D_m} & \tilde{b} &= \frac{b}{D_m} \\
 \tilde{\chi} &= \frac{\chi}{D_m} & \tilde{c} &= \frac{c}{D_m} \sqrt{\frac{D_h}{D_m}}
 \end{aligned} \tag{3.13}$$

Takto dostaneme dve bezrozmerné rovnice, ktoré sú identické s rovnicami (3.1) a (3.2). Jediným rozdielom je, že amplitúdy šumu  $D_h$  a  $D_m$  v bezrozmernej forme rovníc (3.3) a (3.4) sú dve (namiesto  $2D_m$  alebo  $2D_h$ ). Takto získané rovnice už môžeme numericky zintegrovat', viď [21].

### Integrácia samostatnej KPZ a TDGL rovnice

Odstraneníím väzbových členov v rovniciach (3.1) a (3.2) dostaneme samostatnú KPZ a TDGL rovnicu, pre ktoré sú známe hodnoty škálovacích exponentov.

Pre KPZ model sa pre šírku rastúceho povrchu

$$w(L, t) = (\langle h^2 \rangle - \langle h \rangle^2)^{1/2} \quad (3.14)$$

predpokladá škálovanie

$$w(L, t) \sim t^\beta, \quad (3.15)$$

ktorému zodpovedá hodnota  $\beta = 1/3$ . Pomocou simulácií v [21] sa získala hodnota  $\beta \simeq 0.331$ .

Pre TDGL model sa v [21] skúmala časová závislosť priemernej veľkosti domény  $L(t)$  v začiatkovej fáze rastu (t.j. pre malé časy) a pre dostatočne veľké časy. V simuláciách sa uvažujú dve hodnoty amplitúdy šumu (alebo ekvivalentne teploty)  $D_m = 0$  a 1.

Ak  $D_m = 0$ , tak pre TDGL model sa predpokladá

$$L(t) \sim \ln t, \quad (3.16)$$

a preto pri dostatočne veľkých časoch sa priemerná veľkosť domény mení len veľmi málo s časom.

V TDGL modeli so šumom (t.j.  $D_m = 1$ )  $L(t)$  rastie logaritmicky s časom  $t$  pre časy menšie ako čas  $t_c$ ; pre časy  $t \gg t_c$  platí škálovanie, [21]

$$L(t) \sim t^{1/2}, \quad (3.17)$$

ktorému zodpovedá hodnota dynamického exponenta  $z_m = 2$ . Pomocou simulácií v [21] sa získala hodnota  $z_m \simeq 2.01$ .

Všetky hodnoty získané pomocou numerickej integrácie súhlasia s teoretickými hodnotami.

### Integrácia KPZ a TDGL rovníc, ktoré sú navzájom prepojené

Korelačná funkcia  $G(r, r')$  je daná ako, viď [21]

$$G(r, r') = \langle [h(r, t) - h(r', t')]^2 \rangle \sim |r - r'|^{2\alpha} g\left(\frac{|t - t'|}{|r - r'|^z}\right), \quad (3.18)$$

kde  $\alpha$  je exponent hrúbky,  $z$  je dynamický exponent pre rast povrchu, ktorý je popísaný pomocou KPZ rovnice.  $g(x)$  je škálovacia funkcia. Pre malé  $r$  platí  $G(r) \sim r^{2\alpha}$ .

Pre dve rôzne hodnoty konštanty  $\chi = 0$  a  $1$  sa pomocou počítačových simulácií v [21] získali hodnoty exponentu hrúbky  $\alpha \simeq 0.50$  a  $0.70$ , ktoré poukazujú na netriviálne škálovanie tohto modelu. Korelačná dĺžka  $\xi$  a veľkosť domény  $L$  sú všeobecne rovnaké pre diskrétné systémy, no to nemusí platiť pre spojité modely.

# Kapitola 4

## Prechod medzi diskretnými a spojitými modelmi

Ako je uvedené v kapitole 1, existujú dve duálne metódy popisu a štúdia vývoja rozhrania v nerovnováhe: (i) pomocou diskretných rastových modelov; (ii) pomocou stochastických diferenciálnych rovníc. V počiatkoch bol vzťah medzi oboma metódami určovaný len na základe porovnávania výsledkov. Neskôr bola navrhnutá analytická metóda, ako pre daný diskretný model odvodiť zodpovedajúcu Langevinovu rovnicu, podľa ktorej sa riadi časový vývoj rastúceho povrchu.

Prechod od diskretného k spojitému modelu môžeme uskutočniť v dvoch krokoch, ktoré sú popísané napr. v [14, 15]:

1. odvodenie Langevinovej rovnice pre diskretný súbor výšok z majstrovskej rovnice za použitia Kramers-Moyalovho rozvoja [16],
2. prechod od systému rovníc pre diskretný súbor výšok k rovnici pre funkciu  $h(x)$  spojitej priestorovej premennej  $x$ .

V tejto kapitole vysvetlíme obidva kroky podľa postupu uvedeného v [15]. Na určenie diskretnéj Langevinovej rovnice je potrebné určiť zodpovedajúcu maticu prechodu  $W$ . V nasledujúcich podkapitolách sú uvedené matice prechodu pre depozičný model bez difúzie, depozičný model s difúziou a pre RSOS model.

### 4.1 Odvodenie Langevinovej rovnice pre diskretný súbor výšok

Uvažujeme 1-dimenzionálnu mriežku, na ktorej nie sú povolené žiadne vakanie ani previsy. Každá konfigurácia povrchu je určená súborom  $\mathbf{H} = \{h_1, h_2, \dots\}$  s diskretnými hodnotami  $h_i$ , ktoré predstavujú výšky jednotlivých stĺpcov v mieste s indexom  $i$ . Pravdepodobnosť, že sa povrch nachádza v čase  $t$  v konfigurácii  $\mathbf{H}$ , je  $P(\mathbf{H}, t)$ . Pohybová rovnica pre pravdepodobnosť  $P$  so začiatočnou podmienkou



$P(\mathbf{H}, 0)$  je majstrovská rovnica [16], ktorá sa najčastejšie zapisuje ako

$$\frac{\partial P(\mathbf{H}, t)}{\partial t} = \sum_{\mathbf{r}} W(\mathbf{H} - \mathbf{r}; \mathbf{r}) P(\mathbf{H} - \mathbf{r}, t) - \sum_{\mathbf{r}} W(\mathbf{H}; \mathbf{r}) P(\mathbf{H}, t) \pi, \quad (4.1)$$

kde  $W(\mathbf{H}; \mathbf{r})$  je matica prechodu z konfigurácie  $\mathbf{H}$  do  $\mathbf{H} + \mathbf{r}$  a  $\mathbf{r} = \{r_1, r_2, \dots\}$  ( $r_i$  predstavuje rozdiel výšok stĺpca na mieste  $i$  v dvoch po sebe nasledujúcich konfiguráciách). Suma cez  $\mathbf{r}$  znamená sumu cez všetky  $r_i$ .

Riešenie rovnice (4.1) získame pomocou Kramers-Moyalovho rozvoja<sup>1</sup> [16]. Základným predpokladom takéhoto rozvoja je, že  $W(\mathbf{H}; \mathbf{r})$  je prudko píkovaná funkcia  $\mathbf{r}$ , no mení sa pomaly s  $\mathbf{H}$ , t.j. existuje  $\delta > 0$  také, že

$$W(\mathbf{H}; \mathbf{r}) \approx 0, \quad \text{pre } |\mathbf{r}| > \delta, \quad (4.2)$$

$$W(\mathbf{H} + \Delta\mathbf{H}; \mathbf{r}) \approx W(\mathbf{H}; \mathbf{r}), \quad \text{pre } |\Delta\mathbf{H}| < \delta. \quad (4.3)$$

Prvú podmienku vždy spĺňajú depozičné modely, pretože rozdiel medzi dvoma po sebe idúcimi konfiguráciami je vo výške jedného stĺpca, t.j. výška jedného stĺpca sa líši o veľkosť výškovej jednotky  $a$ . Konečné miesto depozície je určené porovnaním výšok susedných stĺpcov (súvisí to so skokovými funkciami). Ľubovoľne malá zmena vo výške môže viesť k nespojitej zmene vo  $W$  bez porušenia podmienky (4.3). Tento problém sa dá zmenšiť pomocou nasledujúcej transformácie času

$$t \rightarrow \tau = \Omega^{-1}t, \quad (4.4)$$

kde  $\Omega$  je parameter „veľkosti“.

Podľa centrálnej limitnej vety sa  $h_i$  dá rozložiť na deterministickú časť  $\Phi_i$  a fluktuácie  $\xi_i$

$$h_i(t) = \Omega \Phi_i(t) + \Omega^{1/2} \xi_i(t). \quad (4.5)$$

Pre zmenu  $h_i$  po depozícii platí

$$h_i - r_i = \Omega \Phi_i(t) + \Omega^{1/2} \xi_i(t) - r_i. \quad (4.6)$$

$P(\mathbf{H}, t)$  sa transformuje ako

$$P(\mathbf{H}, t) = P(\Omega \Phi + \Omega^{1/2} \Xi, t) \equiv \Pi(\Xi, t), \quad (4.7)$$

kde  $\Phi = \{\Phi_1, \Phi_2, \dots\}$  a  $\Xi = \{\xi_1, \xi_2, \dots\}$ .

$\Omega$  rozvoj majstrovskej rovnice môže byť prevedený štandardným spôsobom podľa [16]. Z členov rádu  $\Omega^{1/2}$  dostaneme pohybovú rovnicu pre  $\Phi_i(t)$

$$\frac{d\Phi_i}{d\tau} = K_i^{(1)}(\Phi), \quad (4.8)$$

<sup>1</sup>Pre Kramers-Moyalov rozvoj  $P(y, t)$  pre veličinu  $y$  platí [16]:

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = \sum_{k=1} \frac{(-1)^k}{k!} \frac{\partial^k}{\partial y^k} \left[ K_{i_1, \dots, i_k}^{(k)} P(y, t) \right],$$

kde  $K_{i_1, \dots, i_k}^{(k)}$  je  $k$ -tý moment zodpovedajúcej matice prechodu  $W$ .



kde  $K_i^{(1)}$  je prvý moment matice prechodu

$$K_i^{(1)}(\Phi) = \sum_{\mathbf{r}} r_i W(\Phi; \mathbf{r}). \quad (4.9)$$

Majstrovskú rovnicu aproximujeme Fokker-Planckovou rovnicou pre  $\Pi$  [16]

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Pi(\Xi, \tau)}{\partial \tau} = & - \sum_{ij} \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left[ \frac{\partial K_i^{(1)}(\Phi)}{\partial \Phi_j} \xi_j \Pi(\Xi, \tau) \right] + \\ & + \frac{a}{2} \sum_i \frac{\partial^2}{\partial \xi_i^2} \left[ K_i^{(1)}(\Phi) \Pi(\Xi, \tau) \right], \end{aligned} \quad (4.10)$$

kde sa využíva fakt, že pre depozičné modely sú všetky vyššie momenty matice prechodu diagonálne a úmerné prvému momentu

$$K_{ij}^{(2)}(\Phi) = \sum_{\mathbf{r}} r_i r_j W(\Phi; \mathbf{r}) = a \delta_{ij} K_i^{(1)}(\Phi). \quad (4.11)$$

Rovnice (4.8) a (4.10) sa dajú spojiť do jednej Fokker-Planckovej rovnice pre  $P(\mathbf{H}, t)$

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(\mathbf{H}, t)}{\partial t} = & - \sum_i \frac{\partial}{\partial h_i} \left[ K_i^{(1)}(\mathbf{H}) P(\mathbf{H}, t) \right] + \\ & + \frac{a}{2} \sum_i \frac{\partial^2}{\partial h_i^2} \left[ K_i^{(1)}(\mathbf{H}) P(\mathbf{H}, t) \right]. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Ekvivalentná Langevinova rovnica k rovnici (4.12) je podľa [16]

$$\frac{dh_i}{dt} = K_i^{(1)}(\mathbf{H}) + \eta_i, \quad (4.13)$$

kde  $\eta_i$  je gaussovský šum s nulovou strednou hodnotou  $\langle \eta_i(t') \rangle = 0$  a kovarianciami v tvare

$$\langle \eta_i(t) \eta_j(t') \rangle = K_{ij}^{(2)}(\mathbf{H}) \delta(t - t'). \quad (4.14)$$

Pre depozičné sú všetky vyššie momenty matice prechodu diagonálne a úmerné prvému momentu (4.11), t.j. pre kovariancie platí

$$\langle \eta_i(t) \eta_j(t') \rangle = a K_i^{(1)}(\mathbf{H}) \delta_{ij} \delta(t - t'). \quad (4.15)$$

### Matica prechodu $W$

V prípade depozičných modelov sa dve nasledujúce konfigurácie líšia pridaním jednej častice na jeden stĺpec. To vedie k nasledujúcej forme matice prechodu [14]

$$\begin{aligned} W_{relax}(\mathbf{H}; \mathbf{r}) = & \frac{1}{\tau_0} \sum_k \left[ w_k^{(1)} \delta(r_k - a) \prod_{j \neq k} \delta(r_j) + \right. \\ & + w_k^{(2)} \delta(r_{k-1} - a) \prod_{j \neq k-1} \delta(r_j) + \\ & \left. + w_k^{(3)} \delta(r_{k+1} - a) \prod_{j \neq k+1} \delta(r_j) \right], \end{aligned} \quad (4.16)$$

kde konštanta  $\tau_0$  popisuje priemerný čas depozície vrstvy, ktorý je daný tokom prichádzajúcich častíc a  $w_k^{(i)}$  určuje, či depozícia sa odohráva na pôvodnom mieste dopadu ( $i = 1$ ) alebo na najbližšom susednom mieste ( $i = 2, 3$ ). Pre všetky takéto modely platí [15]

$$K_i^{(1)} = \frac{a}{\tau_0} \left[ w_i^{(1)} + w_{i+1}^{(2)} + w_{i-1}^{(3)} \right]. \quad (4.17)$$

Zároveň pre relaxačné modely platí [14]

$$w_i^{(1)} + w_i^{(2)} + w_i^{(3)} = 1, \quad (4.18)$$

t.j. súčet pravdepodobností, že častica sa prilepí na mieste dopadu alebo na niektorom najbližšom susednom mieste, je 1.

V prípade modelov s difúziou uvažujeme dva procesy: náhodnú depozíciu a difúziu. Pri depozícii je častica uložená na náhodne vybrané miesto (bez relaxácie). Matica prechodu je [14]

$$W_{\text{dep}}(\mathbf{H}; \mathbf{r}) = \frac{1}{\tau'_0} \sum_k \left[ \delta(r_k - a) \prod_{j \neq k} \delta(r_j) \right]. \quad (4.19)$$

Počas difúzie povrchová častica na mieste  $i$  môže preskočiť na miesto  $j$  s pravdepodobnosťou  $\omega_{i \rightarrow j} \in \langle 0, 1 \rangle$  závisiacou na lokálnej konfigurácii v súlade s pravidlami modelu.  $\omega_{i \rightarrow j}$  závisí na vzdialenosti  $|R_i - R_j|$  medzi miestami  $i$  a  $j$ ; typicky sa uvažujú najbližšie susedné častice. Matica prechodu má tvar [14]

$$W_{\text{diff}}(\mathbf{H}; \mathbf{r}) = D \sum_{i,j} \omega_{i \rightarrow j} \delta(r_i + a) \delta(r_j - a) \prod_{k \neq i,j} \delta(r_k), \quad (4.20)$$

kde  $\tau'_0$  je priemerný čas depozície vrstvy a  $D$  je difúzna konštanta. Celková matica prechodu je daná súčtom príspevkov od depozície a difúzie.

## 4.2 Prechod ku Langevinovej rovnici pre spojitú funkciu $h(\mathbf{x})$

Sústava rovníc (4.13) popisuje vývoj výšok stĺpcov  $h_i$  v mieste  $i$  ako funkciu výšok v mieste  $i$  a diskretných susedných miest. Na získanie Langevinovej rovnice pre funkciu  $h(x)$  spojitej premennej  $x$  je potrebná vyhladzovacia procedúra. Predpokladá sa, že existuje hladká funkcia  $h(x)$ , ktorá sa získa z funkcie interpolujúcej cez body  $h_i(t)$ . Potom pomocou Taylorovho rozvoja vyjadríme výšku susedných miest. Na konci tejto procedúry sa získa spojitá Langevinova rovnica s dodatočným šumom s nulovou strednou hodnotou

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = K_i^{(1)}(h(x, t)) + \eta(x, t). \quad (4.21)$$

## Metóda regularizácie

Prakticky sa vyhladzovacia procedúra robí metódou *regularizácie*, pri ktorej sú neanalytické veličiny, ktoré vstupujú do diskretnéj Langevinovej rovnice, nahradené analytickými funkciami.

Podľa konkrétnych pravidiel daného modelu sa určujú pravdepodobnosti skoku  $w_k^{(i)}$ , pomocou ktorých je vyjadrený prvý moment matice prechodu  $K_i^{(1)}$ . Tieto vyjadrenia obsahujú diskretnú skokovú funkciu  $\theta$  a Kroneckerovo  $\delta$ . Pre skokovú funkciu  $\theta(k)$ , definovanú na celých číslach  $k$ , platí

$$\theta(k) = \begin{cases} 1, & \text{pre } k \geq 0 \\ 0, & \text{pre } k < 0. \end{cases} \quad (4.22)$$

Pri regularizačnej procedúre je skoková funkcia  $\theta(k)$  nahradená spojitou funkciou  $\tilde{\theta}(\xi)$ . Voľba funkcie  $\tilde{\theta}(\xi)$  nie je jednoznačná, t.j. rozdielne voľby tejto funkcie môžu viesť k rozdielnym výsledkom. Jedna z možných volieb je

$$\tilde{\theta}(\xi) = \frac{1}{2}[1 + \tanh(C\xi)], \quad (4.23)$$

kde  $C$  je ľubovoľný kladný parameter. Funkcia  $\tanh(C\xi)$  je analytická, t.j. aj funkciu  $\tilde{\theta}(\xi)$  môžeme považovať za analytickú. Z (4.23) skokovú funkciu  $\theta(k)$  dostaneme pre  $C \rightarrow \infty$ . Všeobecne je regularizačná funkcia daná nasledujúcim rozvojom [14]

$$\tilde{\theta}(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} A_k \xi^k. \quad (4.24)$$

V niektorých prípadoch sa uvažuje  $A_0 = 1$ , t.j.

$$\tilde{\theta}(\xi) = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} A_k \xi^k. \quad (4.25)$$

Pretože argument  $\theta$  funkcie predstavuje rozdiel výšok susedných miest, teda výraz obsahujúci prvé a vyššie derivácie  $h(x, t)$  a neobsahujúci absolútny člen, je možné v rozvoji (4.24) uvažovať iba členy do rádu  $\xi^4$ , lebo vyššie mocniny nemôžu do (1.2) prispieť. Potom pre  $\theta$  funkciu platí

$$\tilde{\theta}(\xi) = A_0 + A_1\xi + A_2\xi^2 + A_3\xi^3 + A_4\xi^4. \quad (4.26)$$

Spojitú funkciu  $\tilde{\delta}(\xi)$  môžeme definovať podľa nasledujúcej relácie [14]

$$\tilde{\theta}(-\xi) + \tilde{\theta}(\xi) = 1 + \tilde{\delta}(\xi). \quad (4.27)$$

Substitúciou (4.26) do (4.27) pre  $\tilde{\theta}(\xi)$  dostaneme

$$\tilde{\delta}(\xi) = 2A_0 - 1 + 2A_2\xi^2 + 2A_4\xi^4. \quad (4.28)$$

Substitúciou spojitých vyjadrení  $\theta$  a  $\delta$  funkcií (4.27) a (4.28) do vyjadrenia pravdepodobnosti skoku  $w_k^{(i)}$  a zachovaním členov do štvrtého rádu dostaneme spojitú stochastickú Langevinovu rovnicu, v ktorej jednotlivé koeficienty závisia na pravidlách rastu daného modelu a na použitej regularizácii.

### 4.3 Odvodenie KPZ rovnice pre RSOS model

Kardar-Parisi-Zhangova rovnica (1.9) s gaussovským šumom spĺňajúcim podmienky (1.6) a (1.7) je najjednoduchšou rovnicou popisujúcou rast povrchu s efektom laterálneho rastu. KPZ rovnici (1.9) zodpovedá napr. RSOS model.

Pre majstrovskú rovnicu platí <sup>2</sup>

$$\frac{\partial P(H; t)}{\partial t} = \sum_{H'} W(H', H) P(H'; t) - \sum_{H'} W(H, H') P(H; t). \quad (4.29)$$

Definujeme jednotlivé momenty matice prechodu  $W(H, H')$  <sup>3</sup>

$$\begin{aligned} K_i^{(1)} &= \sum_{H'} (h'_i - h_i) W(H, H'), \\ K_{i,j}^{(2)} &= \sum_{H'} (h'_i - h_i)(h'_j - h_j) W(H, H'), \\ &\vdots \\ K_{i_1, i_2, \dots, i_p}^{(p)} &= \sum_{H'} \prod_{j=1}^p (h'_{i_j} - h_{i_j}) W(H, H'). \end{aligned} \quad (4.30)$$

Predchádzajúcu majstrovskú rovnicu (4.29) môžeme s použitím Kramers-Moyalovho rozvoja previesť na nasledujúcu parciálnu diferenciálnu rovnicu s momentmi prechodu (4.30) [17]

$$\begin{aligned} \frac{\partial P}{\partial t} &= - \frac{\partial}{\partial h_i} (K_i^{(1)} P) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial h_i \partial h_j} (K_{i,j}^{(2)} P) + \dots \\ &+ \frac{(-1)^p}{p!} \prod_{j=1}^p \frac{\partial}{\partial h_{i_j}} (K_{i_1, i_2, \dots, i_p}^{(p)} P) + \dots \end{aligned} \quad (4.31)$$

V rovnici (4.31) sa môžu zanedbať všetky členy s  $p > 2$ . Potom sa rovnica (4.31) redukuje na nasledujúcu Fokker-Planckovu rovnicu [17]

$$\frac{\partial P}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial h_i} (K_i^{(1)} P) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial h_i \partial h_j} (K_{i,j}^{(2)} P). \quad (4.32)$$

Ak je systém dostatočne veľký a vnútorné fluktuácie nie sú príliš veľké, tak Langevinova rovnica je ekvivalentná s Fokker-Planckovou rovnicou [17]

$$\frac{\partial h_i}{\partial t} = K_i^{(1)} + \eta_i, \quad (4.33)$$

<sup>2</sup>V tejto podkapitole je kvôli lepšej názornosti pre RSOS model použité iné značenie ako v podkapitolách 4.1 a 4.2. Dve po sebe nasledujúce konfigurácie povrchu  $H$  a  $H+r$  sú v tejto podkapitole označené ako  $H$  a  $H'$ .

<sup>3</sup> $h'_i$  označuje premennú, ktorá súvisí s konfiguráciou  $H'$ .

kde  $\eta_i$  je gaussovský šum, pre ktorý platí

$$\langle \eta_i \rangle = 0, \quad (4.34)$$

$$\langle \eta_i(t) \eta_j(t') \rangle = K_{ij}^{(2)} \delta(t - t'). \quad (4.35)$$

Na určenie diskretnéj Langevinovej rovnice pre RSOS model potrebujeme určiť zodpovedajúcu maticu prechodu  $W(H, H')$ . Rast systému, ktorý je popísaný RSOS modelom, prebieha nasledovne: najprv náhodne vyberieme miesto na substráte, a potom uložíme časticu, pričom výška vybraného miesta vzrastá o 1, t.j.  $h_i \rightarrow h_i + 1$ . Zároveň musí byť splnené, že rozdiel výšok najbližších susedných miest je  $|h_{i+1} - h_i| = 0, 1, \dots, N$ , viď [18]. Obvykle sa volí  $N = 1$ . RSOS model nepripúšťa difúziu, previsy ani vakancie.

Pre maticu prechodu  $W(H, H')$  pre RSOS model s jednotkovou mriežkovou konštantou  $a$  platí

$$W(H, H') = \frac{1}{\tau_0} \sum_i \left[ \Theta(h_{i+1} - h_i) \Theta(h_{i-1} - h_i) \right. \\ \left. \Theta(N - (h_{i+1} - h_i)) \Theta(N - (h_{i-1} - h_i)) \right. \\ \left. \delta(h'_i, h_i + 1) \prod_{j \neq i} \delta(h'_j, h_j) \right], \quad (4.36)$$

kde  $\tau_0$  predstavuje priemerný čas depozície jednej vrstvy.  $\Theta(x)$  je jednotková skoková funkcia definovaná predpisom (4.22). Výraz  $\Theta(h_{i+1} - h_i) \Theta(h_{i-1} - h_i)$  v rovnici (4.36) vyjadruje, že nová častica môže byť uložená len v lokálnom minime výšky. Výraz  $\Theta(N - (h_{i+1} - h_i)) \Theta(N - (h_{i-1} - h_i))$  v rovnici (4.36) vyjadruje podmienku RSOS modelu. Potom pre prvý a druhý moment matice prechodu  $W(H, H')$  RSOS modelu platí

$$K_i^{(1)} = \frac{a}{\tau_0} \Theta(h_{i+1} - h_i) \Theta(h_{i-1} - h_i) \\ \Theta(N - (h_{i+1} - h_i)) \Theta(N - (h_{i-1} - h_i)), \quad (4.37)$$

$$K_{i,j}^{(2)} = \frac{a^2}{\tau_0} \Theta(h_{i+1} - h_i) \Theta(h_{i-1} - h_i) \\ \Theta(N - (h_{i+1} - h_i)) \Theta(N - (h_{i-1} - h_i)) \delta_{ij}, \quad (4.38)$$

Dosadením týchto momentov (4.37) a (4.38) do (4.33) dostaneme diskretnú Langevinovu rovnicu.

Spojitú Langevinovu rovnicu dostaneme pomocou regularizácie. Všeobecne môžeme skokovú funkciu (4.22) považovať za limitu  $u(\Delta h) \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{2} (1 + \tanh n \Delta h)$ . Keďže funkcia  $\tanh x$  je analytická, tak aj  $u(x)$  môžeme považovať za analytickú aspoň pre  $x > 0$ . Pre  $x = 0$  je skoková funkcia  $\Theta(k)$  definovaná ako hodnota analytického predĺženia, t.j. skoková funkcia  $\Theta(k)$  definovaná v (4.22) je analytická pre  $x \geq 0$ .

Argument skokovej funkcie (4.22) je rovný rozdielu výšok  $\Delta h$  najbližších susedných stĺpcov, t.j. argument  $\Delta h$  nie je väčší ako najväčší povolený rozdiel výšok  $N$ ,

a tak skokovú funkciu (4.22) môžeme rozvinúť do Taylorovho rozvoja v tvare (4.26). Potom pre prvý moment  $K_i^{(1)}$  platí

$$\begin{aligned} K_i^{(1)} = \frac{a}{\tau_0} [ & A_0 + A_1(h_{i+1} - h_i) + A_2(h_{i+1} - h_i)^2 + \dots] \\ & [A_0 + A_1(h_{i-1} - h_i) + A_2(h_{i-1} - h_i)^2 + \dots] \\ & [A_0 + A_1(N - (h_{i+1} - h_i)) + A_2(N - (h_{i+1} - h_i))^2 + \dots] \\ & [A_0 + A_1(N - (h_{i-1} - h_i)) + A_2(N - (h_{i-1} - h_i))^2 + \dots] \end{aligned} \quad (4.39)$$

$h_i(t)$  nahradíme hladkou funkciou  $h(x, t)$  s  $x = ia$ . Výraz  $(h_{i\pm 1} - h_i)$  rozvineme do mocnín  $a$ , t.j. dostaneme

$$h_{i\pm 1}(t) - h_i(t) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(\pm a)^k}{k!} \frac{\partial^k h(x, t)}{\partial x^k} \Big|_{x=ia}. \quad (4.40)$$

Výpočet prvého momentu  $K_i^{(1)}$  matice prechodu  $W(H, H')$  prevedieme v symbolickom jazyku **Maple**. Pri výpočtoch dosasíme nasledujúce hodnoty:  $a = 1$ ,  $N = 1$ . Pre tieto hodnoty platí

$$K_i^{(1)}(x) = \nu \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\lambda}{2} \left( \frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 + F, \quad (4.41)$$

$$K_{ij}^{(2)} = \frac{a^2}{\tau_0} \delta(x - x') + O(a^4), \quad (4.42)$$

kde jednotlivé koeficienty sú dané predpismi

$$\begin{aligned} \nu = \frac{1}{\tau_0} \Big\{ & -A_0^3(2A_2 + 3A_3 + 4A_4) + A_0^2[(A_1^2 - 2A_2^2 - 3A_3^2 - 4A_4^2) \\ & - A_1(A_2 + 2A_3 + 3A_4) - A_2(5A_3 + 6A_4) - 7A_3A_4] \\ & + A_0A_1[A_1(A_1 + 2A_2 + 2A_3 + 2A_4) + A_2(A_2 + 2A_3 + 2A_4) \\ & + A_3(A_3 + 2A_4) + A_4] \Big\}, \\ \lambda = \frac{2}{\tau_0} \Big\{ & 2A_0^3(2A_2 + 3A_3 + 6A_4) + A_0^2(-2A_1^2 + 2A_1A_2 + 4A_1A_4 + 2A_2^2 \\ & + 2A_2A_4 - 3A_3^2 - 6A_3A_4 - 4A_4^2) + A_0A_1(-2A_1^2 - 2A_1A_3 - 2A_1A_4 \\ & + 4A_2^2 + 4A_2A_3 + 4A_2A_4) + 2A_0A_3(A_3^2 + 2A_2^2 + A_2A_3^2 + 2A_2A_4) \\ & + 2A_0A_2A_4 - A_1^4 - 2A_1^3(A_2 + A_3 + A_4) - A_1^2(A_2^2 + A_3^2 + A_4^2) \\ & - 2A_1(A_1A_2A_3 + A_2A_4 + A_1A_3A_4) \Big\}, \\ F = \frac{1}{\tau_0} \Big\{ & A_0^4 + A_0^2(A_1^2 + A_2^2 + A_3^2 + A_4^2) + 2A_0^2[A_0(A_1 + A_2 + A_3 + A_4) \\ & + A_1(A_2 + A_3 + A_4) + A_2(A_3 + A_4) + A_3A_4] \Big\}. \end{aligned} \quad (4.43)$$

Z predchádzajúcich vyjadrení dostaneme spojitú Langevinovu rovnicu pre RSOS model

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h(x, t) + \frac{\lambda}{2} [\nabla h(x, t)]^2 + F + \eta(x, t). \quad (4.44)$$

Pre šum  $\eta(x, t)$  platí

$$\langle \eta(x, t) \eta(x', t') \rangle = \frac{1}{\tau_0} \delta(x - x') \delta(t - t'). \quad (4.45)$$

Rovnica (4.44) je ekvivalentná KPZ rovnici (1.9), t.j. RSOS model patrí ku KPZ triede univerzality.

# Kapitola 5

## Spojité popis TCSS modelu

Táto kapitola obsahuje odvodenie diferenciálnych rovníc pre dvojzložkový single-step model (TCSS model). Tento model je popísaný v podkapitole 2.3 a zakladá sa na single-step SOS modeli, viď podkapitola 1.2.

### 5.1 Odvodenie KPZ rovnice pre single-step model

Spojité Langevinovu rovnicu pre single-step model určíme podľa postupu uvedeného v kapitole 4. Pri odvádzaní zodpovedajúcej matice prechodu  $W(H, H')$  vychádzame z matice prechodu pre depozičný model bez relaxácie (4.19), ktorú môžeme zapísať v nasledujúcom tvare

$$W_{\text{dep}}(H, H') = \frac{1}{\tau_0} \sum_i \delta(h'_i, h_i + a) \prod_{i \neq j} \delta(h'_j, h_j), \quad (5.1)$$

kde význam jednotlivých veličín je popísaný v kapitole 4. Príslušné kronekerovské  $\delta$  zaručujú, že konfigurácia sa zmení iba v jednom bode, v ktorom vzrastie výška o  $a$ .

Pre single-step model požadujeme, aby každá nová častica bola uložená v lokálnom minime výšky, a aby rozdiel výšok susedných stĺpcov spĺňal podmienku  $|h_i - h_j| = 1$ . Z tejto podmienky vyplýva, že  $a = 2$ . Tieto podmienky môžeme splniť doplnením  $\delta(h_i, h_{i+1} - 1)\delta(h_i, h_{i-1} - 1)$  do (5.1), t.j. pre maticu prechodu pre single-step model platí

$$W(H, H') = \frac{1}{\tau_0} \sum_{i=1}^L \delta(h_i, h_{i+1} - 1)\delta(h_i, h_{i-1} - 1)\delta(h'_i, h_i + 2) \prod_{i \neq j} \delta(h'_j, h_j). \quad (5.2)$$

Pre prvý  $K_i^{(1)}$  a druhý  $K_{i,j}^{(2)}$  moment matice prechodu  $W(H', H)$  podľa (4.30) platí

$$K_i^{(1)} = \sum_{H'} (h'_i - h_i) W(H, H'), \quad (5.3)$$

$$K_{ij}^{(2)} = \sum_{H'} (h'_i - h_i)(h'_j - h_j) W(H, H') = 2\delta_{ij} K_i^{(1)}. \quad (5.4)$$



Dve po sebe nasledujúce konfigurácie  $H$  a  $H'$  sa líšia pridaním jednej častice na náhodne vybrané miesto, t.j. v rovnici (5.3) resp. (5.4) je len jeden nenulový člen. Po dosadení sumy (5.2) získame

$$K_i^{(1)} = \frac{2}{\tau_0} \delta(h_i, h_{i+1} - 1) \delta(h_i, h_{i-1} - 1), \quad (5.5)$$

$$K_{ij}^{(2)} = \frac{4}{\tau_0} \delta(h_i, h_{i+1} - 1) \delta(h_i, h_{i-1} - 1) \delta_{ij}. \quad (5.6)$$

Pomocou  $K_i^{(1)}$  môžeme určiť Langevinovu rovnicu pre diskretný súbor výšok

$$\frac{dh_i}{dt} = K_i^{(1)} + \eta_i, \quad (5.7)$$

kde  $\eta_i$  je gaussovský šum, pre ktorý platí

$$\langle \eta_i(t') \rangle = 0, \quad (5.8)$$

$$\langle \eta_i(t) \eta_j(t') \rangle = 2K_i^{(1)} \delta_{ij} \delta(t - t'). \quad (5.9)$$

Spojitú Langevinovu rovnicu získame pomocou metódy regularizácie, ktorá je popísaná v podkapitole 4.2. Použijeme spojité vyjadrenia funkcií  $\Theta(x)$  a  $\delta(x)$  v tvare (4.24) a (4.27).

Pretože argument  $\theta$  funkcie predstavuje rozdiel výšok susedných miest, teda výraz obsahujúci prvé a vyššie derivácie  $h(x, t)$  a neobsahujúci absolútny člen, je možné v rozvoji (4.24) uvažovať iba členy do rádu  $x^4$ , lebo vyššie mocniny nemôžu do (1.2) prispieť. Substitúciou (4.24) do (4.27) dostaneme

$$\delta(x) = 2A_0 - 1 + 2A_2x + 2A_4x^4. \quad (5.10)$$

Potom pre  $K_i^{(1)}$  platí

$$K_i^{(1)} = \frac{2}{\tau_0} \left\{ 2A_0 - 1 + 2A_2 [(h_{i+1} - h_i) - 1]^2 + 2A_4 [(h_{i+1} - h_i) - 1]^4 \right\} \\ \left\{ 2A_0 - 1 + 2A_2 [(h_{i-1} - h_i) - 1]^2 + 2A_4 [(h_{i-1} - h_i) - 1]^4 \right\}. \quad (5.11)$$

$h_i(t)$  nahradíme hladkou funkciou  $h(x, t)$  s  $x = ia$ . Výraz  $(h_{i\pm 1} - h_i)$  rozvineme do mocnín  $a$  podľa vzťahu (4.40).

Pre prvý moment  $K_i^{(1)}$  matice prechodu  $W(H', H)$  (5.2) podľa výpočtu v programe Maple dostaneme

$$K_i^{(1)} = \frac{2}{\tau_0} (-1 + 2A_0 + 2A_2 + 2A_4)^2 \\ - \frac{32}{\tau_0} (A_2 + 2A_4)(-1 + 2A_0 + 2A_2 + 2A_4) \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \\ + \frac{32}{\tau_0} [(2A_0 - 1)(A_2 + 6A_4) - 2A_2A_4 - 2(A_2^2 + 2A_4^2)] \left( \frac{\partial h}{\partial x} \right)^2. \quad (5.12)$$

Dosadením do spojitkej Langevinovej rovnice

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = K_i^{(1)}(h(x, t)) + \eta(x, t) \quad (5.13)$$

dostaneme rovnicu

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h(x, t) + \frac{\lambda}{2} [\nabla h(x, t)]^2 + F + \eta(x, t), \quad (5.14)$$

kde pre jednotlivé koeficienty platí

$$\begin{aligned} \nu &= -\frac{32}{\tau_0} (A_2 + 2A_4)(-1 + 2A_0 + 2A_2 + 2A_4), \\ \lambda &= \frac{64}{\tau_0} [(2A_0 - 1)(A_2 + 6A_4) - 2A_2A_4 - 2(A_2^2 + 2A_4^2)], \\ F &= \frac{2}{\tau_0} (-1 + 2A_0 + 2A_2 + 2A_4)^2. \end{aligned} \quad (5.15)$$

Rovnica (5.14) je ekvivalentná KPZ rovnici (1.9), t.j. single-step model patrí ku KPZ triede univerzality. Získaná Langevinova rovnica pre single-step model sa odlišuje od rovnice, ktorá je uvedená v [23]. Súvisí to s tým, že v [23] sa vychádza z predpokladu, že začiatočný „rovný“ podklad je zvolený ako

$$\left. \begin{aligned} h(i) &= 0, & i \text{ párne} \\ h(i) &= 1, & i \text{ nepárne} \end{aligned} \right\} i \in \{1, 2, \dots, L\}. \quad (5.16)$$

Vďaka tomuto dodatočnému predpokladu na substráte nemôžu vzniknúť také miesta, aby rozdiel výšok susedných miest nespĺňal podmienku  $|h_i - h_j| = 1$ . Potom pre maticu prechodu platí

$$W(H, H') = \frac{1}{\tau_0} \sum_{i=1}^L \Theta(h_{i+1} - h_i) \Theta(h_{i-1} - h_i) \delta(h'_i, h_i + 2) \prod_{j \neq i} \delta(h'_j, h_j). \quad (5.17)$$

Z tejto matice prechodu dostaneme spojitú Langevinovu rovnicu pre RSOS model v tvare

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h(x, t) + \frac{\lambda}{2} [\nabla h(x, t)]^2 + F + \eta(x, t), \quad (5.18)$$

kde jednotlivé koeficienty sú dané predpismi

$$\begin{aligned} \nu &= \frac{8}{\tau_0} A_0 A_1, \\ \lambda &= \frac{16}{\tau_0} (2A_0 A_2 - A_1^2), \\ F &= \frac{2}{\tau_0} A_0^2. \end{aligned} \quad (5.19)$$

Hodnota argumentu  $\Theta$ -funkcie v matici prechodu (5.17) je vždy  $+1$  alebo  $-1$ . Týmto hodnotám argumentu zodpovedajú hodnoty 0 a 1. V tomto prípade diskretnú  $\Theta$ -funkciu aproximujeme funkciou, ktorá vznikne pripočítaním jednej polovice ku vhodnej nepárnej funkcii<sup>1</sup>, napr. funkciou [23]

$$\Theta(x) = \frac{1}{1 + \exp(-Cx)} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{C}{2}x\right), \quad (5.20)$$

kde  $C$  je kladná konštanta. Pre  $C \rightarrow \infty$  dostaneme  $\Theta$ -funkciu. Pretože všetky párne derivácie nepárnej funkcie v bode  $x = 0$  sú nulové a  $\Theta$ -funkcia je rastúca, dostaneme vzťahy pre hodnoty koeficientov  $A_i$

$$A_0 = \frac{1}{2}, \quad A_1 > 0, \quad A_2 = 0. \quad (5.21)$$

Po dosadení do (5.19) dostaneme

$$\nu = \frac{4}{\tau_0} A_1, \quad \lambda = -\frac{16}{\tau_0} A_1^2, \quad F = \frac{1}{2\tau_0}. \quad (5.22)$$

Kladná hodnota koeficientu  $\nu$  pri druhej derivácii vyjadruje vyhladzovanie povrchu vďaka podmienke na rast v lokálnom minime. Záporná hodnota koeficientu  $\lambda$  zodpovedá tomu, že okamžitá rýchlosť rastu je nižšia na naklonenom povrchu (s rastúcim sklonom rastie hodnota členu  $\left(\frac{\partial h(x, t)}{\partial x}\right)^2$ ). To je spôsobené tým, že na svahu je menej rastových miest (vyplýva to z geometrie). Nenulová hodnota koeficientu  $\lambda$  (na znamienku nezáleží) zaraďuje tento model do triedy univerzality KPZ.

## 5.2 Majstrovská rovnica pre TCSS model

Pri odvádzaní matice prechodu pre TCSS model vychádzame z matice prechodu pre single-step model (5.2). Oproti klasickému single-step modelu v TCSS modeli priradíme každej častici ďalší stupeň voľnosti, t.j. hodnotu, ktorú môže nadobúdať (viď podkapitola 2.3). Je to spin častice, ktorý môže nadobúdať hodnotu  $+1$  alebo  $-1$ . Rastúci povrch je popísaný pomocou:

- výškového vektora  $H = \{h_1, h_2, \dots, h_L\}$ , kde  $h_i$  označuje výšku povrchu v mieste  $i$ ,
- spinového vektora  $S = \{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_L\}$ , kde  $\sigma_i$  označuje spin častice na povrchu v mieste  $i$ .

<sup>1</sup>Tým je zabezpečené, že odchýlka hodnoty diskretnéj  $\Theta$ -funkcie od hodnoty získanej aproximovanou  $\Theta$ -funkciou bude v oboch bodoch  $+1$  a  $-1$  presne rovnaká.

Pravdepodobnosť prídania častice so spinom  $\sigma$  na miesto rastu  $i$  je úmerná  $\exp[-\Delta E(i, \sigma)/k_B T]$ . Normalizovanú pravdepodobnosť obsadenia miesta rastu  $i$  časticou so spinom  $\sigma$  definujeme ako <sup>2</sup>

$$p(i, \sigma) = \frac{\exp\{-[\Delta E(i, \sigma)]/k_B T\}}{\sum_{j,s} \exp\{[-\Delta E(j, s)]/k_B T\}}, \quad (5.23)$$

kde suma prebieha cez všetky typy spinov a cez všetky miesta rastu na substráte a zmena energie  $\Delta E(i, \sigma)$  závisí na spine troch najbližších susedov podľa (2.1).

Na určenie majstrovskej rovnice pre TCSS model potrebujeme určiť maticu prechodu  $W(H, S, H', S')$  <sup>3</sup> zo začiatkovej konfigurácie  $(H, S)$  do konečnej konfigurácie  $(H', S')$ . Matica  $W(H, S, H', S')$  má význam pravdepodobnosti prechodu medzi týmito konfiguráciami. Platí <sup>4</sup>

$$W(H, S; H', S') = \frac{1}{\tau_0} \sum_{i=1}^L \left\{ \sum_{\sigma=\pm 1} \left[ \frac{\exp\{-[\Delta E(i, \sigma)]/k_B T\}}{\sum_{j,s} \exp\{[-\Delta E(j, s)]/k_B T\}} \delta(\sigma'_i, \sigma) \prod_{j \neq i} (\sigma'_j, \sigma_j) \right] \right. \\ \left. \delta(h_i, h_{i+1} - 1) \delta(h_i, h_{i-1} - 1) \delta(h'_i, h_i + 2) \prod_{j \neq i} \delta(h'_j, h_j) \right\} \quad (5.24)$$

Pre opačnú maticu prechodu  $W(H', S'; H, S)$  platí <sup>5</sup>

$$W(H', S'; H, S) = \frac{1}{\tau_0} \sum_{i=1}^L \left\{ \sum_{\sigma=\pm 1} \left[ \frac{\exp\{-[\Delta E'(i, \sigma)]/k_B T\}}{\sum_{j,s} \exp\{[-\Delta E(j, s)]/k_B T\}} \delta(\sigma_i, \sigma) \prod_{j \neq i} (\sigma'_j, \sigma_j) \right] \right. \\ \left. \delta(h'_i, h'_{i+1} - 1) \delta(h'_i, h'_{i-1} - 1) \delta(h_i, h'_i + 2) \prod_{j \neq i} \delta(h'_j, h_j) \right\} \quad (5.25)$$

Z týchto matíc prechodu  $W(H, S, H', S')$  a  $W(H', S', H, S)$  zostavíme podľa rovnice (4.29) majstrovskú rovnicu v tvare

$$\frac{\partial P(H, S; t)}{\partial t} = \sum_{H', S'} W(H', S'; H, S) P(H', S'; t) - \sum_{H', S'} W(H, S; H', S') P(H, S; t), \quad (5.26)$$

<sup>2</sup>Vo výraze (5.23) index  $j$  označuje jednotlivé miesta na substráte a  $s$  má rovnaký význam ako  $\sigma$ , t.j. označuje spin častice.

<sup>3</sup>Matica  $W(H, S; H', S')$  je daná súčnom dvoch členov „korelovaných“ rovnakým uzlom. Vďaka korelácii v uzle  $i$  to nie je jednoduchý súčin nezávislých matíc v priestoroch  $\{H\}$  a  $\{S\}$ , t.j.  $W(H, S; H', S') \neq W(H, H')W(S, S')$ .

<sup>4</sup>Výraz  $\delta(\sigma'_i, \sigma)$  v rovnici (5.24) vyjadruje, že na miesto  $i$  je pridaná častica so spinom  $\sigma$ . Táto  $\delta$ -funkcia je nenulová pre všetky miesta so spinom  $\sigma$ , no to nespôsobuje problém, pretože pri určovaní matice prechodu (5.24) sčítame cez všetky diskkrétne miesta  $i$  na povrchu, a tak výraz  $\delta(h'_i, h_i + 2)$  charakterizujúci depozičný model zabezpečí, že iba jeden výraz  $p(i, \sigma)\delta(\sigma'_i, \sigma) = p(i, \sigma'_i)$  je nenulový.

<sup>5</sup>Pre  $\Delta E'(i, \sigma)$  platí:  $\Delta E'(i, \sigma) = -J\sigma(\sigma'_{i-1} + \sigma'_i + \sigma'_{i+1}) - h\sigma$ .

kde  $P(H, S; t)$  je pravdepodobnosť, že v čase  $t$  sa povrch nachádza v konfigurácii  $(H, S)$ . Suma cez všetky konfigurácie znamená sumu cez všetky premenné  $h_i, \sigma(i)$ . Symbolické sumy  $\sum_{H'}, \sum_{S'}$  predstavujú:  $\sum_{H'} = \sum_{h'_1=0}^{\infty} \sum_{h'_2=0}^{\infty} \cdots \sum_{h'_L=0}^{\infty}$ ,  $\sum_{S'} = \sum_{\sigma'_1} \sum_{\sigma'_2} \cdots \sum_{\sigma'_L}$ . Platí <sup>6 7</sup>

$$\begin{aligned} \sum_{H', S'} W(H, S; H', S') P(H, S; t) &= \frac{1}{\tau_0} \sum_{i=1}^L \sum_{\sigma \pm 1} \sum_{h'_i=0}^{\infty} p(i, \sigma) \delta(h'_i, h_i + 2) \\ &\quad \delta(h_i, h_{i+1} - 1) \delta(h_i, h_{i-1} - 1) P(H, S; t), \end{aligned} \quad (5.27)$$

$$\begin{aligned} \sum_{H', S'} W(H', S'; H, S) P(H', S'; t) &= \frac{1}{\tau_0} \sum_{i=1}^L \sum_{\sigma \pm 1} \sum_{h'_i=0}^{\infty} \sum_{\sigma'_{i-1}, \sigma'_i, \sigma'_{i+1}} p'(i, \sigma) \delta(h_i, h'_i + 2) \\ &\quad \delta(h'_i, h_{i+1} - 1) \delta(h'_i, h_{i-1} - 1) P(\tilde{H}, \tilde{S}; t), \end{aligned} \quad (5.28)$$

kde platí

$$p'(i, \sigma) = \frac{\exp\{-[\Delta E'(i, \sigma)]/k_B T\}}{\sum_{j,s} \exp\{-[\Delta E(j, s)]/k_B T\}}, \quad (5.29)$$

$$\tilde{H} = \{h_1, \dots, h_{i-1}, h'_i, h_{i+1}, \dots, h_L\}, \quad (5.30)$$

$$\tilde{S} = \{\sigma_1, \dots, \sigma_{i-2}, \sigma'_{i-1}, \sigma'_i, \sigma'_{i+1}, \sigma_{i+2}, \dots, \sigma_L\}. \quad (5.31)$$

Potom pre majstrovskú rovnicu teda platí

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(H, S; t)}{\partial t} &= \frac{1}{\tau_0} \sum_{i=1}^L \sum_{\sigma \pm 1} \sum_{h'_i=0}^{\infty} \sum_{\sigma'_{i-1}, \sigma'_i, \sigma'_{i+1}} p'(i, \sigma) \delta(h_i, h'_i + 2) \\ &\quad \delta(h'_i, h_{i+1} - 1) \delta(h'_i, h_{i-1} - 1) P(\tilde{H}, \tilde{S}; t) \\ &\quad / \frac{1}{\tau_0} \sum_{i=1}^L \sum_{\sigma \pm 1} \sum_{h'_i=0}^{\infty} p(i, \sigma) \delta(h'_i, h_i + 2) \\ &\quad \delta(h_i, h_{i+1} - 1) \delta(h_i, h_{i-1} - 1) P(H, S; t). \end{aligned} \quad (5.32)$$

### 5.3 Langevinove rovnice pre vývoj výšky $h(\mathbf{x}, t)$ a magnetizácie $m(\mathbf{x}, t)$ pre $T \rightarrow \infty$

Riešenie rovnice (5.32) získame pomocou Kramers-Moyalovho rozvoja [16]. Matrica prechodu  $W(H, S; H', S')$  musí pre  $\delta > 0$  spĺňať podmienky (4.2) a (4.3).

<sup>6</sup>Vďaka súšinu  $\prod_{j \neq i} \delta(h'_j, h_j)$  zo sumy cez všetky konfigurácie  $\sum_{H'}$  zostane len jedná suma  $\sum_{h'_i}$ .

<sup>7</sup>So sčítania  $\sum_{S'(\sigma'_{j \neq i})}$  zostanú tri súčty  $\sum_{\sigma'_{i-1}} \sum_{\sigma'_i} \sum_{\sigma'_{i+1}}$ .

Prvá podmienka je splnená, pretože pri single-step modeli môže depozícia prebiehať iba na miestach, pre ktoré platí  $|h_i - h_j|$ , t.j.  $\exists \delta > 0$ , pre ktoré depozícia nemôže prebiehať, a tak zodpovedajúca matica prechodu je nulová.

Druhá podmienka je splnená pre depozičné modely, pretože rozdiel medzi dvoma po sebe idúcimi konfiguráciami je vo výške jedného stĺpca, t.j. líšia sa pridaním jednej častice na miesto rastu  $i$ .

Pri odvádzaní zodpovedajúcich Fokker-Planckových a Langevinových rovníc postupujeme podľa postupu, ktorý je uvedený v kapitole 4.

### Vývoj výšky $h(\mathbf{x}, t)$

Pre vývoj výšky potrebujeme zostaviť Fokker-Planckovu rovnicu v tvare (4.32) s momentom matice prechodu (5.24) označeným ako  $L_i^{(1)}(H)$ . Pre  $L_i^{(1)}(H)$  platí

$$\begin{aligned} L_i^{(1)} &= \sum_{H'} (h'_i - h_i) W(H, S; H', S') = 2W(H, S; H', S') \\ &= p(i, \sigma) \delta(\sigma'_i, \sigma) \frac{2}{\tau_0} \delta(h_i, h_{i+1} - 1) \delta(h_i, h_{i-1} - 1) \\ &= p(i, \sigma) \delta(\sigma'_i, \sigma) K_i^{(1)}, \end{aligned} \quad (5.33)$$

kde  $K_i^{(1)}$  je prvý moment matice prechodu pre single step model, vid' (5.5). Potom pre Fokker-Planckovu rovnicu pre vývoj výšky platí

$$\frac{\partial P(H, t)}{\partial t} = p(i, \sigma) \delta(\sigma'_i, \sigma) \left[ -\frac{\partial}{\partial h_i} (K_i^{(1)} P) + \frac{\partial^2}{\partial h_i^2} (K_i^{(1)} P) \right] \quad (5.34)$$

Uvažujeme špeciálny prípad, keď  $T \rightarrow \infty$ , t.j.  $\frac{1}{k_B T} \rightarrow 0$ . V tomto špeciálnom prípade platí

$$\lim_{T \rightarrow \infty} [p(i, \sigma) \delta(\sigma'_i, \sigma)] = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\exp\{-[\Delta E(i, \sigma')]/k_B T\}}{\sum_{j,s} \exp\{-[\Delta E(j, s)]/k_B T\}} = \frac{1}{2L}, \quad (5.35)$$

t.j. pre prvý moment matice prechodu  $L_i^{(1)}$  platí

$$L_i^{(1)} = \frac{1}{2L} K_i^{(1)}. \quad (5.36)$$

Pre  $K_i^{(1)}$  sme v podkapitole 5.1 urobili spojité vyjadrenie pomocou metódy regularizácie, a tak môžeme priamo podľa (5.13) určiť Langevinovu rovnicu pre vývoj výšky

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = \nu_{T \rightarrow \infty} \nabla^2 h(x, t) + \frac{\lambda_{T \rightarrow \infty}}{2} [\nabla h(x, t)]^2 + F_{T \rightarrow \infty} + \eta_{h, T \rightarrow \infty}(x, t), \quad (5.37)$$

kde pre jednotlivé koeficienty platí

$$\begin{aligned}\nu_{T \rightarrow \infty} &= \frac{\nu}{2L} = -\frac{16}{\tau_0 L} (A_2 + 2A_4)(-1 + 2A_0 + 2A_2 + 2A_4), \\ \lambda_{T \rightarrow \infty} &= \frac{\lambda}{2L} = \frac{32}{\tau_0 L} [(2A_0 - 1)(A_2 + 6A_4) - 2A_2 A_4 - 2(A_2^2 + 2A_4^2)], \\ F_{T \rightarrow \infty} &= \frac{F}{2L} = \frac{1}{\tau_0 L} (-1 + 2A_0 + 2A_2 + 2A_4)^2.\end{aligned}\quad (5.38)$$

Dostali sme Langevinovu rovnicu pre vývoj výšky, ktorý nie je spojený (nezávisí) s magnetizáciou  $m(x, t)$ .

### Vývoj magnetizácie $\mathbf{m}(\mathbf{x}, t)$

Podobne ako v predchádzajúcom prípade potrebujeme pre vývoj magnetizácie zostaviť Fokker-Planckovu rovnicu v nasledujúcom tvare

$$\frac{\partial P(S, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \sigma_i} (M_i^{(1)} P) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \sigma_i \partial \sigma_j} (M_{i,j}^{(2)} P), \quad (5.39)$$

kde pre  $M_i^{(1)}$  platí

$$\begin{aligned}M_i^{(1)} &= \sum_{S'} (\sigma'_i - \sigma_i) W(H, S; H', S') = \sum_{S'} m_i W(H, S; H', S') \\ &= m_i p(i, \sigma) \delta(\sigma'_i, \sigma) \frac{1}{\tau_0} \delta(h_i, h_{i+1} - 1) \delta(h_i, h_{i-1} - 1) \\ &= \frac{m_i}{2} p(i, \sigma) \delta(\sigma'_i, \sigma) K_i^{(1)},\end{aligned}\quad (5.40)$$

kde  $m_i = \sigma'(i) - \sigma(i)$  je magnetizácia, t.j. rozdiel spinov častíc na mieste  $i$ .

V prípade  $T \rightarrow \infty$  pre pravdepodobnosť pridania častice so spinom  $\sigma$  na miesto  $i$  platí (5.35), t.j. pre prvý moment matice prechodu  $M_i^{(1)}$  platí

$$M_i^{(1)} = \frac{m_i}{4L} K_i^{(1)}. \quad (5.41)$$

Pri prechode ku spojitému popisu predpokladáme, že  $m_i \rightarrow m(x)$ , a tak pre Langevinovu rovnicu pre vývoj magnetizácie platí

$$\frac{\partial m(x, t)}{\partial t} = b_{T \rightarrow \infty} m \nabla^2 h(x, t) + \frac{c_{T \rightarrow \infty}}{2} m [\nabla h(x, t)]^2 + d_{T \rightarrow \infty} m + \eta_{m, T \rightarrow \infty}(x, t), \quad (5.42)$$

kde pre jednotlivé koeficienty platí

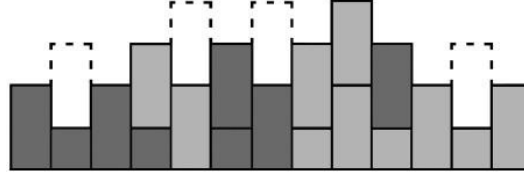
$$\begin{aligned}b_{T \rightarrow \infty} &= \frac{\nu}{4L} = -\frac{8}{\tau_0 L} (A_2 + 2A_4)(-1 + 2A_0 + 2A_2 + 2A_4), \\ c_{T \rightarrow \infty} &= \frac{\lambda}{4L} = \frac{16}{\tau_0 L} [(2A_0 - 1)(A_2 + 6A_4) - 2A_2 A_4 - 2(A_2^2 + 2A_4^2)], \\ d_{T \rightarrow \infty} &= \frac{F}{4L} = \frac{1}{2\tau_0 L} (-1 + 2A_0 + 2A_2 + 2A_4)^2.\end{aligned}\quad (5.43)$$

Rovnica (5.42) obsahuje niektoré členy rovnice (3.2), pomocou ktorej sa popisuje rast depozičného modelu binárnej zliatiny.

## 5.4 Analýza vývoja výšky $h(\mathbf{x}, t)$ a magnetizácie $m(\mathbf{x}, t)$ pre $T \rightarrow 0$

V tejto podkapitole uvidíme pre  $T \rightarrow 0$  niektoré špeciálne prípady začiatočnej konfigurácie výšok  $H = \{h_1, h_2, \dots, h_L\}$  a spinov  $S = \{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_L\}$ , pre ktoré vieme predpovedať správanie TCCS modelu.

Uvažujme najprv modifikáciu, že spin pridávanej častice závisí len na spine jednej častice na mieste rastu  $i$ . Ak pri tomto zjednodušení uvažujeme všeobecnú konfiguráciu výšok  $H$  a spinov  $S$  (napr. konfigurácia na obr. 5.1), tak sa postupne bude opakovať začiatočná konfigurácia povrchu. Za týchto podmienok dostaneme správanie modelu, ktoré patrí do KPZ triedy univerzality.



Obrázok 5.1: Vývoj povrchu TCCS modelu pre  $T \rightarrow 0$  a závislosť len na spine častice na mieste rastu  $i$ . Tmavé a svetlé oblasti označujú dva typy spinov častíc substrátu. Čiarkované čiary označujú pozície, na ktoré môže byť uložená nová častica.

Ak spin pridávanej častice závisí len na spine jednej častice na mieste rastu  $i$ , pravdepodobnosť  $p(i, \sigma)$  (5.23) závisí na rozdieli spinov na tomto mieste, t.j. na magnetizácii  $m_i = \sigma'_i - \sigma_i$ . V tomto prípade sa normalizačný faktor v (5.23) neuplatní, a tak predpokladáme  $p(i, \sigma) = m_i = \sigma'_i - \sigma_i$ . Z toho vyplýva, že v matici prechodu (5.24) namiesto pravdepodobnosti  $p(i, \sigma)$  bude vystúpovať magnetizácia  $m_i$ . Z tejto matice prechodu môžeme odvodiť Langevinove rovnice pre vývoj výšky  $h(x, t)$  a magnetizácie  $m(x, t)$ .

Ak uvažujeme, že voľba spinu pridávanej častice závisí na spine troch najbližších susedov, tak na miesto rastu  $i$  bude pridaná častica so spinom, ktorý je rovnaký ako spin väčšiny z troch najbližších susedov na miestach  $i - 1$ ,  $i$  a  $i + 1$ . Vývoj výšky  $h(x, t)$  a magnetizácie  $m(x, t)$  vieme predpovedať len v niektorých špeciálnych prípadoch začiatočnej konfigurácie, keď dostaneme správanie modelu, ktoré patrí do KPZ triedy univerzality:

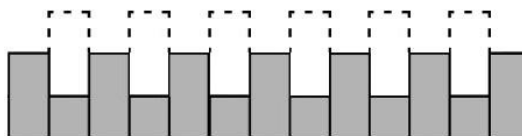
- **konfigurácia na obr. 5.2:**

Na jednotlivé miesta rastu môže byť pridaná len častica so spinom, ktorý je rovnaký ako spin častíc, z ktorých sa skladá substrát.

- **konfigurácia na obr. 5.3a), 5.3b):**

Na miesta rastu  $i$  môže byť pridaný len jeden typ častice so spinom, ktorý zodpovedá spinu väčšiny z troch najbližších susedných častíc, takže po zaplnení prvej vrstvy dostaneme rovnakú situáciu ako na obr. 5.2.

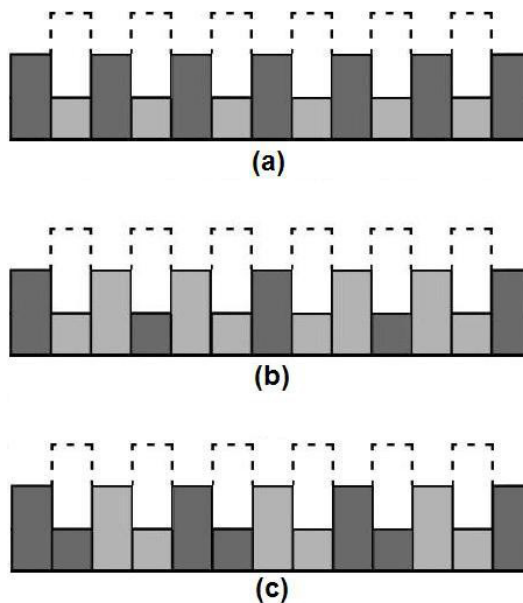




Obrázok 5.2: Vývoj povrchu TCSS modelu pre  $T \rightarrow 0$  a závislosť na spine troch najbližších susedných častíc. Konfigurácia s jedným typom spinu častíc. Tmavé a svetlé oblasti označujú dva typy spinov častíc substrátu. Čiarkované čiary označujú pozície, na ktoré môže byť uložená nová častica.

- **konfigurácia na obr. 5.3c):**

Pridávaním jednotlivých častíc sa bude opakovať začiatočná konfigurácia povrchu.



Obrázok 5.3: Vývoj povrchu TCSS modelu pre  $T \rightarrow 0$  a závislosť na spine troch najbližších susedných častíc. Konfigurácia s dvoma typmi spinu častíc. Tmavé a svetlé oblasti označujú dva typy spinov častíc substrátu. Čiarkované čiary označujú pozície, na ktoré môže byť uložená nová častica.

V prípade všeobecnej konfigurácie výšok  $H = \{h_1, h_2, \dots, h_L\}$  a spinov  $S = \{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_L\}$  (napr. na obr. (5.1)) bez ďalších aproximácií nevieme predpovedať vývoj výšky  $h(x, t)$  a magnetizácie  $m(x, t)$ .

# Záver

V tejto práci sme sa zaoberali modelmi rastu dvojzložkových systémov, a to ako z hľadiska diskretných modelov, tak i z pohľadu spojitých stochastických rovníc, ktoré sú s týmito modelmi spojené. Bol vypracovaný prehľad modelov rastu binárnych systémov a boli získané nové výsledky pre spojité rovnice.

V kapitole 2 bol vypracovaný prehľad diskretných modelov rastu binárnych systémov, ktorý poskytuje náhľad na použitie jednoduchých modelov i zložitejších modelov umožňujúcich modelovanie reálnych dejov, ktoré v skutočnosti prebiehajú v dvoch a viac komponentných systémoch. Pochopenie týchto procesov je dôležité napr. pre nanotechnológie.

Kapitola 3 poskytuje pohľad na dva dvojzložkové modely (depozičný model a MBE model binárnej zliatiny), pre ktoré sú známe spojité popisy. S týmito popismi sme porovnali výsledky odvodené v kapitole 5.

Prechod od diskretných modelov ku spojitým rovniciam, ktorým sme sa zaoberali v kapitole 4, predstavuje jeden zo základných problémov spojených so štúdiom rastových procesov. Vzťah medzi diskretnými modelmi a zodpovedajúcimi Langevinovými rovnicami nebol celkom jednoznačný. Nedávno bola pre jednoduché jednozložkové modely použitá definovaná metóda regularizácie poskytujúca priamy vzťah medzi diskretnými rastovými modelmi a stochastickými diferenciálnymi rovnicami.

Sformulovali sme všeobecné majstrovské rovnice obsahujúce korelácie medzi priestorovými súradnicami a magnetizáciou pre dvojzložkový diskretný model - konkrétne pre magnetický single-step model (TCSS model), viď kapitola 5. Táto kapitola ďalej obsahuje: (a) analýzu odvodenia spojitého popisu pre TCSS model pre špeciálny prípad  $T \rightarrow \infty$ , (b) analýzu vývoja výšky  $h(x, t)$  a magnetizácie  $m(x, t)$  pre TCSS model pre druhý špeciálny prípad  $T \rightarrow 0$ . Langevinova rovnica pre vývoj výšky  $h(x, t)$  pre  $T \rightarrow \infty$  zodpovedá spojitkej rovnici, ktorá charakterizuje KPZ triedu univerzality, t.j. nedochádza ku zmene asymptotického správania (triede univerzality). Langevinova rovnica pre vývoj magnetizácie  $m(x, t)$  pre  $T \rightarrow \infty$  obsahuje niektoré členy z Langevinovej rovnice pre depozičný model binárnej zliatiny, ktorá je uvedená v kapitole 3. Vývoj výšky  $h(x, t)$  a magnetizácie  $m(x, t)$  pre TCSS model pre  $T \rightarrow 0$  veľmi závisí na začiatkových podmienkach, t.j. na konfigurácii výšok a spinov. V niektorých špeciálnych prípadoch dostaneme správanie modelu, ktoré patrí ku KPZ triede univerzality. V prípade všeobecnej konfigurácie výšok a spinov sa bez ďalších aproximácií nedá určiť vývoj výšky  $h(x, t)$  a magnetizácie  $m(x, t)$ .

Námetom pre ďalšiu prácu je správanie magnetického single-step modelu vo vyš-

ších dimenziách (predovšetkým v  $(2+1)$  dimenzii) alebo aj správanie podobných modelov, ktoré zahŕňajú iný typ interakcie, inú geometriu a s tým súvisiace podmienky pre ukladanie jednotlivých častíc na rastúci substrát. Veľmi dôležité a potrebné je zahrnutie elastických interakcií vznikajúcich v dôsledku rôznej veľkosti mriežkových konštánt oboch komponentov.

Najviac používanou metódou pre štúdium takýchto rastových procesov sú počítačové simulácie, no vyšetrenie asymptotického správania je sťažené efektami konečného objemu a prechodovými režimami. Ak poznáme spojitý popis modelu, tak presne poznáme celý časový vývoj, t.j. aj asymptotické správanie. Odvodenie spojitého popisu pre vyššie uvedené komplikovanejšie modely môže byť zložitejšie resp. vo viacerých prípadoch aj neuskutočniteľné.

# Literatúra

- [1] Barabási, A.-L., Stanley, H.E.: *Fractal concepts in surface growth*, Cambridge University Press, Cambridge, 1995.
- [2] Kotrla, M.: *Growth of rough surfaces*, Czech J. Phys. **42** (1992) 449–544.
- [3] Family, F., Vicsek T.: *Scaling of the active zone in the Eden process on percolation networks and the ballistic deposition model*, J. Phys. A **18** (1985) L75–L81.
- [4] El-Nashar, H.F., Cerdeira, H.A.: *A discrete surface growth model for two components*, Phys. A **283** (2000) 6–10.
- [5] Wang, W., Cerdeira, H.A.: *Surface growth of two kinds of particle deposition models*, Phys. Rev. E **52** (1995) 6308–6313.
- [6] Kotrla, M., Předota, M.: *Interplay between kinetic roughening and phase ordering*, Europhys. Lett. **39**(3) (1997) 251–256.
- [7] Kotrla, M., Slanina, F., Předota, M.: *Scaling in a two-component surface-growth model*, Phys. Rev. B **58** (1998) 10 003–10 011.
- [8] Öksüzoglu, R.M., Mieke, G., Fuess, H.: *Kinetic interface roughening and magneto resistance of sputter-deposited  $Fe/Ni_{75}B_{25}$  multilayers*, Applied Surface Science **240** (2005) 405–413.
- [9] Léonard, F., Laradji, M., Desai, R.C.: *Molecular beam epitaxy in the presence of phase separation*, Phys. Rev. B **55** (1997) 1887–1894.
- [10] Shim, Y., Landau, D.P., Pal, S.: *Domain growth and surface roughening in Monte Carlo simulations of  $A_{0.5}B_{0.5}$  film growth*, Phys. Rev. E **58** (1998) 7571–7579.
- [11] Hohenberg, P. C., Halperin, B. I.: *Theory of dynamic critical phenomena*, Rev. Mod. Phys. **49** (1977) 435.
- [12] Bray, A. J.: *Theory of phase-ordering kinetics*, Adv. Phys. **43** (1994) 357–459.
- [13] Thayer, G.E., Ozolins, V., Schmid, A.K., Barlet, N.C., Asta, M., Hoyt, J.J., Chiang, S., Hwang, R.Q.: *Role of Stress in Thin Film Alloy Thermodynamics: Competition between Alloying and Dislocation Formation*, Phys. Rev. Lett. **86** (2001) 660–663.

- 
- [14] Předota, M., Kotrla, M.: *Stochastic equations for simple discrete models of epitaxial growth*, Phys. Rev. E **54** (1996) 3933–3942.
  - [15] Baggio, Ch., Vardavas, R., Vvedensky, D.D.: *Fokker-Planck equation for lattice deposition models*, Phys. Rev. E **64** (2001) 045103(R).
  - [16] Van Kampen, N.G.: *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*, North-Holland, Amsterdam, 1981.
  - [17] Park, K., Kahng, B.: *Exact derivation of the Kardar-Parisi-Zhang equation for the restricted solid-on-solid model*, Phys. Rev. E **51** (1995) 796–798.
  - [18] Kim, J.M., Kosterlitz, J.M.: *Growth in a Restricted Solid-on-Solid Model*, Phys. Rev. Lett **62** (1989) 2289–2292.
  - [19] Drossel, B., Kardar, M.: *Interplay between phase ordering and roughening on growing films*, Eur. Phys. B **36** (2003) 401–410.
  - [20] Drossel, B., Kardar, M.: *Phase ordering and roughening on growing films*, Phys. Rev. Lett. **85** (2000) 614–617.
  - [21] Oskoe, E.N., Khajepour, M. R.H., Sahini, M.: *Numerical simulation of continuum model of growth of thin composite films*, Phys. Rev. E **69** (2004) 061606.
  - [22] Glauber, R.J.: *Time-Dependent Statistics of the Ising model*, J. Math. Phys. **4** (1963) 294–307.
  - [23] Předota, M.: *Diplomová práce: Modely růstu povrchů*, Praha, 1995.